



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO PAULO
CAMPUS DIADEMA

BEATRIZ CASTRO FERREIRA CARVALHO
PEDRO MAIA FERNANDES

DETERMINAÇÃO DAS PROPRIEDADES MECÂNICAS DE
GÉIS DE CASEINATO DE SÓDIO VIA REDES NEURAIAS
ARTIFICIAIS

DIADEMA

2019

BEATRIZ CASTRO FERREIRA CARVALHO

PEDRO MAIA FERNANDES

**DETERMINAÇÃO DAS PROPRIEDADES MECÂNICAS DE
GÉIS DE CASEINATO DE SÓDIO VIA REDES NEURAIAS
ARTIFICIAIS**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado
como exigência parcial para obtenção de
Bacharel em Engenharia Química ao Instituto
de Ciências Ambientais, Químicas e
Farmacêuticas da Universidade Federal de
São Paulo – Campus Diadema.

Orientador: Prof. Dr. Tiago Dias Martins

Co-orientadora: Profa. Dra. Fabiana Perrechil
Bonsanto

DIADEMA

2019

Carvalho, Beatriz Castro Ferreira
Fernandes, Pedro Maia

Determinação das propriedades mecânicas de géis de caseinato de sódio via redes neurais artificiais / Carvalho, B. C. F.; Fernandes, P. M. --
Diadema, 2019.

43f.

Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Química)
– Universidade Federal de São Paulo – Campus Diadema, 2019

Orientador: Prof. Dr. Tiago Dias Martins

1. Proteína 2. Polissacarídeos 3. Propriedades mecânicas 4. Redes Neurais 5.
Inteligência artificial 6. Simulação I. Determinação das propriedades
mecânicas de géis de caseinato de sódio via redes neurais artificiais.

CDD 006.32

AGRADECIMENTOS

Agradeço em primeiro lugar a minha mãe, que sempre esteve presente e nos momentos mais difíceis me ofereceu todo tipo de apoio. Agradeço também ao meu pai, que me incentivou no curso e me fez ter vontade de buscar sempre o melhor para mim. Aos meus irmãos, o agradecimento fica por estarmos sempre fazendo piadas mesmo nos piores momentos, afinal de contas seremos 3 futuros engenheiros com dificuldades semelhantes, que com certeza passaremos por todas elas juntos.

Agradeço também especialmente a toda a turma da engenharia química 09 integral, sem toda essa união que adquirimos ao longo dos anos não teria sido a mesma coisa. Cada auxílio recebido em momentos de grande dificuldade foi essencial para que eu chegasse até aqui.

Agradeço a todos os meus amigos da UNIFESP que foram essenciais além da sala de aula, que contribuíram muito com o meu desenvolvimento pessoal e na construção de memórias que ficarão sempre guardadas no coração. Agradeço aos meus amigos de infância, que por mais distantes que estivessem, também sempre foram fundamentais e serviram como apoio na minha vida.

Agradeço aos meus orientadores Tiago Dias e Fabiana Perrechil, por acreditarem em nós, por terem me oferecido oportunidades que também foram fundamentais para o meu desenvolvimento. Além disso, deixo registrada aqui a minha admiração por serem professores extremamente humanizados e por se preocuparem com seus alunos muito além da sala de aula.

Por último, deixo aqui o meu agradecimento final ao meu eterno parceiro Pedro Maia, por passarmos por todo o tipo de dificuldades juntos ao longo de todos esses anos e termos superado cada uma delas. Espero muito que continuemos parceiros pra toda vida, e tenho a certeza que será um profissional extraordinário.

Beatriz Castro Ferreira Carvalho

Primeiramente, gostaria de agradecer aos meus pais, Tereza Cristina Maia e Aguinaldo Aragon que se dedicaram para me fornecer sempre as melhores oportunidades desde pequeno e claramente sem eles não teria chegado onde estou. Segundamente tenho que agradecer minha irmã Paula Maia por ter me apoiado e me feito rir sempre que eu precisei, além disso

agradeço a todos os membros da minha família que de alguma forma contribuíram para que eu concluísse essa etapa.

Gostaria também de usar esse espaço para agradecer às pessoas com quem estive comigo desde o começo da graduação e as quais cultivei um grande carinho. Dentre elas estão Kamila Moraes, Marcella Alencar, Patrícia Aquino, Bruna Couto, Ian Irizawa, Evandro Varandas e os membros da república alcateia Rodrigo Mocarzel, Paulo Henrique, Matheus Barone, Diogo Martins, Gian Pietro, Maurício Mateus, Guilherme Sérgio, Kayo Alexandre e Bruno Lustosa. Além disso muito obrigado à Nathália Schiavinato, a qual me apoiou muito durante esses anos todos.

Um obrigado aos meus professores informais Lucas Alves e Mohamad Al Bannoud e toda a O9 integral, a graduação teria sido bem mais difícil e bem menos divertida sem vocês. Obrigado à Cintia Ferrini, por ser minha amizade mais antiga e por ainda a mantermos durante essa etapa da minha vida. Às entidades do campus Diadema (em especial à EPEQ Jr. e o CAUEQ), e aos seus membros durante os anos por me proporcionar pessoas e experiências incríveis, que com certeza me ajudaram a ser um ser humano melhor.

Um obrigado especial à Ingrid Faria Lopes, com quem está comigo em todos os momentos durante esse período e que desejo que continuemos compartilhando momentos incríveis um com o outro.

Obrigado ao meu orientador Tiago Dias Martins e minha co-orientadora Fabiana Perrechil que me apresentaram a essa ferramenta e me apoiaram muito durante esse processo.

Por fim, agradeço especialmente à minha parceira Beatriz Castro, por todos os momentos bons e ruins que compartilhamos juntos desde o nosso primeiro ano. Fico muito feliz por ter iniciado com você essa jornada e por ter terminado ela junto com você. Espero que continuemos com essa parceria para a vida e que possamos passar por muito mais coisa.

Pedro Maia Fernandes.

RESUMO

As proteínas e os polissacarídeos são dois tipos de biopolímeros responsáveis pela estrutura, textura e estabilidade dos alimentos. Existem poucos trabalhos que desenvolveram modelos matemáticos que correlacionem o comportamento mecânico-estrutural sobre a gelificação de proteínas com ou sem a presença de polissacarídeos, e os modelos encontrados para esse tipo de sistema complexo ainda são muito limitados. Pensando nisso, o presente trabalho teve como objetivo estudar a previsibilidade das propriedades mecânicas dos géis de caseinato de sódio com ou sem a adição de polissacarídeos por meio da aplicação de redes neurais artificiais. Assim, para os dados de entrada foram inseridos valores numéricos de concentração da proteína caseinato de sódio e polissacarídeos, tipo de polissacarídeo (inulina, carragena e goma jataí), temperatura de gelificação e razão glucona- δ -lactona (GDL)/caseinato. Para os dados de saída, foram inseridos valores de tensão na ruptura, deformação na ruptura e módulo de Young. Dessa forma, variou-se e analisou-se o número de camadas intermediárias, bem como os diferentes métodos matemáticos utilizados para treinar as redes neurais artificiais (RNA). Para o problema proposto se utilizou como critério os menores valores de Função Objetivo e os maiores de R^2 , encontrando a rede 5-16-12-3(5 neurônios na camada de entrada, 16 na primeira camada intermediária, 12 na segunda camada intermediária e 3 na camada de saída) como a mais adequada para o estudo. Porém a mesma não atingiu resultados satisfatórios para a deformação de ruptura, logo foi feita uma nova RNA apenas para essa variável encontrando uma configuração ótima de 5-4-18-1. Os resultados mostraram como redes neurais podem ser ferramentas versáteis para muitos estudos inclusive para o estudo proposto.

Palavras Chaves: proteína, polissacarídeos, propriedades mecânicas, redes neurais, inteligência artificial, simulação.

ABSTRACT

Proteins and polysaccharides are two types of biopolymers responsible for food structure, texture and stability. There are few studies that have developed mathematical models that correlate mechanical-structural behavior on protein gelation with or without the presence of polysaccharides, and the models found for this type of complex system are still very limited. The objective of this study was to study the predictability of the mechanical properties of sodium caseinate gels with or without the addition of polysaccharides by the application of artificial neural networks. Thus, for the input data, numerical values of the concentration of sodium caseinate protein and polysaccharides, polysaccharide type (inulin, carrageenan and locust bean gum), gelation temperature and glucone- δ -lactone ratio (GDL) / caseinate were entered. For the output data, tensile values at rupture, strain at rupture and Young's modulus were entered. Thus, by varying and analyzing the number of intermediate layers, as well as the different mathematical methods used to train ANNs (Artificial Neural Network). For the proposed problem we used as criteria the lowest values of Objective Function and the highest of R^2 , finding the network 5-16-12-3 (5 neurons in the input layer, 16 in the first intermediate layer, 12 in the second intermediate layer and 3 in the output layer), as the most appropriate for the study. However it did not reach satisfactory results for the rupture deformation, so a new ANN was made just for this variable, finding an optimal configuration of 5-4-18-1. The results showed how neural networks can be a versatile tool for many studies including the proposed one.

Keywords: sodium caseinate, polysaccharides, mechanical properties, neural networks, artificial intelligence, simulation

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1: ESTRUTURA BÁSICA DE UM NEURÔNIO.....	8
FIGURA 2: MODELO DE NEURÔNIO ARTIFICIAL (HAYKIN, 2009).....	8
FIGURA 3: FUNÇÃO DE ATIVAÇÃO LIMIAR (HAYKIN, 2007)	10
FIGURA 4: FUNÇÃO DE ATIVAÇÃO LINEAR POR PARTES (HAYKIN, 2007).....	10
FIGURA 5: FUNÇÃO DE ATIVAÇÃO SIGMOIDE (HAYKIN, 2007)	11
FIGURA 6: ESQUEMA DE APRENDIZADO SUPERVISIONADO (BRAGA, 2000).....	12
FIGURA 7: ESTRUTURA DE REDE NEURAL COM 5 VARIÁVEIS DE ENTRADA, UMA CAMADA INTERMEDIÁRIA E 3 VARIÁVEIS DE SAÍDA	15
FIGURA 8: ESTRUTURA DE REDE NEURAL COM 5 VARIÁVEIS DE ENTRADA, DUAS CAMADAS INTERMEDIÁRIA E 3 VARIÁVEIS DE SAÍDA.	16
FIGURA 9: VALORES PREDITOS VERSUS SIMULADOS PELA RNA 5-16-12-3 PARA A TENSÃO DE RUPTURA.....	27
FIGURA 10: VALORES PREDITOS VERSUS SIMULADOS PELA RNA 5-16-12-3 PARA A DEFORMAÇÃO DE RUPTURA.	28
FIGURA 11: VALORES PREDITOS VERSUS SIMULADOS PELA RNA 5-16-12-3 PARA A MÓDULO DE YOUNG.....	28
FIGURA 12: ERRO PERCENTUAL PONTO A PONTO DA RNA 5-16-12-3 PARA A VARIÁVEL TENSÃO DE RUPTURA.	29
FIGURA 13: ERRO PERCENTUAL PONTO A PONTO DA RNA 5-16-12-3 PARA A VARIÁVEL DEFORMAÇÃO DE RUPTURA.	30
FIGURA 14: ERRO PERCENTUAL PONTO A PONTO DA RNA 5-16-12-3 PARA A VARIÁVEL MÓDULO DE YOUNG.	30

FIGURA 15: VALORES PREDITOS VERSUS SIMULADOS PELA RNA 5-4-18-1 PARA A DEFORMAÇÃO DE RUPTURA.	33
FIGURA 16: ERRO PERCENTUAL PONTO A PONTO DA RNA 5-4-18-1 PARA A VARIÁVEL DEFORMAÇÃO DE RUPTURA.	33

LISTA DE TABELAS

TABELA 1: DADOS EXPERIMENTAIS UTILIZADOS COMO VARIÁVEIS DE ENTRADA	17
TABELA 2: DADOS EXPERIMENTAIS UTILIZADOS COMO VARIÁVEIS DE SAÍDA.....	19
TABELA 3: FUNÇÕES DE ATIVAÇÃO E FUNÇÃO OBJETIVO DE CADA ETAPA DA REDE COM O ALGORITMO LEVENBERG-MARQUARDT.	22
TABELA 4: COEFICIENTES DE CORRELAÇÃO DE CADA ETAPA COM O ALGORITMO LEVENBERG- MARQUARDT.	23
TABELA 5: FUNÇÕES DE ATIVAÇÃO E FUNÇÃO OBJETIVO DE CADA ETAPA DA REDE COM O ALGORITMO BAYESIAN REGULARIZATION.....	23
TABELA 6: COEFICIENTES DE CORRELAÇÃO DE CADA ETAPA COM O ALGORITMO BAYESIAN REGULARIZATION.	24
TABELA 7: FUNÇÕES DE ATIVAÇÃO E FUNÇÃO OBJETIVO DE CADA ETAPA DA REDE COM O ALGORITMO CONJUGATE GRADIENT WITH POWELL/BEALE RESTARTS.	24
TABELA 8: COEFICIENTES DE CORRELAÇÃO DE CADA ETAPA COM O ALGORITMO CONJUGATE GRADIENT WITH POWELL/BEALE RESTARTS.	25
TABELA 9: DESEMPENHO DAS MELHORES CONFIGURAÇÕES DA FUNÇÃO OBJETIVO E NÚMERO DE PARÂMETROS PARA CADA ALGORITMO UTILIZADO.....	26
TABELA 10: DESEMPENHO DAS MELHORES CONFIGURAÇÕES DO COEFICIENTE DE CORRELAÇÃO DE TODAS AS ETAPAS PARA CADA ALGORITMO UTILIZADO.	26
TABELA 11: FUNÇÕES DE ATIVAÇÃO E FUNÇÃO OBJETIVO DE CADA ETAPA DA REDE COM O ALGORITMO LEVENBERG-MARQUARDT CONSIDERANDO UMA ÚNICA VARIÁVEL DE SAÍDA (DEFORMAÇÃO NA RUPTURA).....	32

TABELA 12: DESEMPENHO DAS MELHORES CONFIGURAÇÕES DO COEFICIENTE DE CORRELAÇÃO	
DE TODAS AS ETAPAS CONSIDERANDO UMA ÚNICA VARIÁVEL DE SAÍDA (DEFORMAÇÃO NA	
RUPTURA).	32

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	3
	2.1 BIOPOLÍMEROS: PROTEÍNAS E POLISSACARÍDEOS	3
	2.2 CASEINATO DE SÓDIO	4
	2.3 INULINA, CARRAGENA E GOMA JATAÍ (LBG)	5
	2.4 PROPRIEDADES MECÂNICAS DOS GÉIS DE BIOPOLÍMEROS	6
	2.5 REDES NEURAIS.....	6
	2.5.1 <i>Redes neurais e o neurônio biológico.....</i>	<i>7</i>
	2.5.2 <i>Redes Neurais como ferramenta computacional.....</i>	<i>9</i>
	2.5.3 <i>Métodos de Otimização.....</i>	<i>11</i>
	2.5.4 <i>Aplicações das RNAs.....</i>	<i>13</i>
	2.5.5 <i>Função objetivo</i>	<i>14</i>
3	MATERIAIS E MÉTODOS	15
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	22
	4.1 TREINAMENTO DAS RNAS.....	22
5	CONCLUSÃO	35
6	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	37
	APÊNDICE A – PESOS E BIAS DOS NEURÔNIOS PARA A RNA 5-16-12-3.....	42

1 INTRODUÇÃO

As proteínas e os polissacarídeos são dois tipos de biopolímeros responsáveis pela estrutura, textura e estabilidade dos alimentos devido às suas propriedades funcionais (Doublier *et al.*, 2000). Consequentemente, é importante identificar as condições ótimas nas quais o polissacarídeo e a proteína podem ser mais efetivos para as propriedades desejadas (Munhoz *et al.*, 2004). O caseinato de sódio, em especial, é amplamente utilizado pela indústria de alimentos como fonte de proteína devido às suas propriedades emulsificantes e capacidade de gelificação (Braga *et al.*, 2006). Ele forma soluções estáveis em pH neutro e gelifica quando o sistema é levado ao ponto isoelétrico, o que é característico de produtos lácteos acidificados como o iogurte (Gozzo *et al.*, 2009). A acidificação dos sistemas pode ser realizada pela adição de glucona- δ -lactona (GDL), que é hidrolisada em ácido glucônico com o tempo, levando a uma redução no valor do pH (Takeuchi e Cunha, 2008).

Apesar do grande número de estudos sobre a gelificação de proteínas com ou sem a presença de polissacarídeos e das propriedades mecânicas dos géis (Braga *et al.*, 2006; Perrechil *et al.*, 2009; Picone *et al.*, 2011), ainda existem poucos trabalhos que desenvolveram modelos matemáticos que correlacionem o seu comportamento mecânico-estrutural e os modelos encontrados para esse tipo de sistema complexo são ainda muito limitados (Perrot *et al.*, 2011; Foucquier *et al.*, 2012).

As Redes Neurais Artificiais (RNA) têm sido empregadas com sucesso para a descrição e modelagem de processos nas mais diversas áreas do conhecimento, desde economia, administração e até controle de processos industriais complexos (Klassen, 2008). Em geral, uma Rede Neural Artificial é um sistema constituído por elementos de processamento interconectados, chamados neurônios, os quais estão dispostos em camadas (uma camada de entrada, camadas ocultas ou intermediárias e uma camada de saída), sendo que cada neurônio é responsável pelo mapeamento linear e não-linear de dados de entrada/saída, determinado principalmente pela sua função de ativação (Bishop *et al.*, 2000). Cada camada gera o modelo neural que é obtido por meio da determinação de seus pesos sinápticos. Matematicamente, os valores de ativação para cada neurônio são a soma das informações recebidas multiplicadas pelos pesos correspondentes (Braga *et al.*, 2000).

A aplicação de redes neurais já foi empregada com sucesso na modelagem de propriedades mecânicas de géis proteicos (He e Mu, 2013) e representa uma alternativa viável e prática na busca de resultados confiáveis para a previsibilidade de dados em forma de uma série de saídas de interesse. Além disso, a utilização das RNA é uma excelente ferramenta na predição de propriedades físicas de difícil caracterização. No entanto, não foram encontrados demais estudos sobre a modelagem das propriedades mecânicas de géis biopoliméricos com o uso de redes neurais.

O principal objetivo desse trabalho foi a obtenção de uma RNA, capaz de prever propriedades mecânicas de tensão na ruptura, deformação na ruptura e módulo de Young de géis proteicos ou mistos (compostos por proteína e polissacarídeo) a partir das seguintes condições de entrada: concentração da proteína, concentração de carboidrato, tipo do carboidrato, temperatura e razão GDL/caseinato. Para isso, foram testadas estruturas com diferentes números de camadas e diferentes números de neurônios, além de utilizar diversos algoritmos a fim de se obter a melhor estrutura de rede.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Biopolímeros: proteínas e polissacarídeos

Polímeros podem ser considerados macromoléculas que são constituídas por cadeias de unidades menores que se repetem. Recebem o nome de acordo com a junção das palavras gregas *Polys* a qual significa muitos e *meros* a qual significa partes. Dentre os inúmeros polímeros conhecidos estão as proteínas e os polissacarídeos. Ambos os citados anteriormente podem ser categorizados como biopolímeros, já que são provenientes de fontes naturais (Anita e Bayardo, 2015).

As proteínas normalmente são formadas por um conjunto de pelo menos 20 aminoácidos, apesar de existirem casos onde esse polímero é formado por menos unidades. Esses polímeros são formados por ligações de um grupo carboxila ($-\text{COOH}$) de um aminoácido com o grupo amino de outro ($-\text{NH}_2$), onde essa ligação é denominada de ligação peptídica. Algo interessante a ser abordado e que dá uma característica peculiar às proteínas é que essa ligação peptídica possui propriedades que impedem certos desdobramentos da molécula, pois a ligação possui caráter intermediário entre ligações covalente simples e duplas. Apesar dessa rigidez há pontos de flexibilidade e desdobramentos entre as ligações de carbono com carbono e as de carbono e nitrogênio, desde que a última seja do aminoácido original e não proveniente da ligação peptídica (Anita e Bayardo, 2015).

De forma análoga às proteínas, os polissacarídeos são polímeros formados por múltiplas unidades de monossacarídeos, os quais são carboidratos, como a glicose (Anita e Bayardo, 2015). O polissacarídeo mais comum para ser citado é a celulose, formada por milhares de unidades de glicose. Monossacarídeos são formados por uma cadeia simples de carbonos, porém em solução aquosa monossacarídeos com mais de quatro carbonos passam a apresentar configuração cíclica (Anita e Bayardo, 2015). Esse composto pode ser extraído de diversas maneiras da natureza, como de plantas, sementes, frutas e até mesmo de animais. Os polissacarídeos são amplamente utilizados na indústria, principalmente a alimentícia, farmacêutica e de cosméticos. A maior parte é utilizada como estabilizantes, espessantes ou gelificantes (Stephen, 2006).

Os biopolímeros vem tomado bastante espaço na indústria em substituição aos polímeros provenientes do petróleo, especialmente devido à sua biodegradabilidade. Além disso, outro fator que favorece os biopolímeros são suas variadas aplicações em muitos setores da indústria (Brito, Agrawal e Mélo, 2011).

2.2 Caseinato de Sódio

As caseínas são consideradas grandes grupos de fosfoproteínas encontradas no leite bovino, constituindo aproximadamente 80% de suas proteínas (Bounous *et al.*, 1988). Tanto as caseínas quanto os caseinatos possuem amplas aplicações na indústria alimentícia devido ao seu valor nutricional.

O caseinato de sódio é um ingrediente obtido mediante precipitação da caseína em seu ponto isoelétrico, seguido de neutralização com hidróxido de sódio (Kinsella, 1984). O caseinato de sódio é capaz de produzir géis em pH próximo ao seu ponto isoelétrico. A acidificação dos sistemas pode ser realizada pela adição de glucona- δ -lactona (GDL), que é hidrolisada em ácido glucônico com o tempo, levando a uma redução no valor do pH (Takeuchi e Cunha, 2008).

Sistemas contendo GDL têm sido amplamente estudados com a finalidade de se produzirem géis advindos de soluções de biopolímeros (Braga *et al.*, 2006; Cavallieri e Cunha, 2008; Gu, Campbell e Euston, 2009), devido às várias vantagens desse precursor ácido em relação ao uso de microrganismos. Também, a vantagem de utilizar este acidulante é a possibilidade de acidificação em diferentes taxas dependendo da temperatura, presença de outros ingredientes ou concentração de GDL (Braga, Menossi e Cunha, 2006; Takeuchi e Cunha, 2008). Em uma mistura complexa de biopolímeros que pode sofrer separação de fases e gelificação, a taxa de acidificação desempenha um papel na macro e microestrutura final da mistura. A morfologia e as propriedades reológicas serão então consequências das cinéticas de separação de fases e formação de gel (Doublier *et al.*, 2000; Kasapis, 2008; Lore'n e Hermansson, 2000).

2.3 Inulina, carragena e goma jataí (LBG)

A inulina é um polissacarídeo cujas propriedades funcionais estão relacionadas à redução dos níveis de colesterol e lipídios no sangue e à melhora na absorção de cálcio e magnésio. Além disso a inulina não é digerida no intestino delgado, mas é fermentada no cólon por bactérias do ácido lático, favorecendo o crescimento de microbiota (Rowland *et al.*, 1998; Dello Staffolo *et al.*, 2004; Ohrr, 2004) e promovendo a regulação do tempo de trânsito gastrointestinal (Roberfroid *et al.*, 1993).

Dependendo das condições ambientais e da sua concentração, a inulina pode formar géis, modificando o comportamento reológico dos sistemas aos quais ela é adicionada (Kim e Wang, 2001; Kim *et al.*, 2001). As propriedades gelificantes são desejáveis em uma ampla gama de produtos alimentícios, especialmente produtos lácteos.

As carragenas são polissacarídeos de alta massa molecular com três frações principais (κ -kappa, ι -iota and λ -lambda) que variam em função do número e posição dos grupos sulfato nas moléculas de galactose (Ribeiro *et al.*, 2004). Em temperaturas elevadas (maior que 50°C, dependendo da concentração de sal) κ -carragena (κ -CR) existe em solução como espirais aleatórias. No entanto, quando a temperatura é suficientemente baixa, o polímero sofre uma transição para duplas hélices, podendo ocorrer formação de gel (Cavallieri *et al.*, 2001).

Sistemas mistos contendo proteínas do leite e κ -CR têm sido extensivamente estudados (Sabadini *et al.*, 2006), principalmente devido às interações específicas entre o κ -CR e caseína (Snoeren *et al.*, 1975), levando a produtos formulados com maior consistência e viscosidade. A avaliação de sistemas mistos contendo proteínas de soja e κ -CR também tem sido amplamente examinada sob o ponto de vista de suas propriedades reológicas de cisalhamento ou análise do perfil de textura, TPA (Zhu *et al.*, 2008).

A goma jataí, ou LBG, é um polissacarídeo amplamente utilizado nos produtos lácteos devido à sua capacidade de fornecer soluções muito viscosas em concentrações relativamente baixas, mas não forma géis por si só (Perrechil *et al.*, 2009). Esses polissacarídeos apresentam atividade de superfície, facilidade em formar ligações com as

moléculas de água (alta solubilidade) e originam soluções com viscosidade elevada (CUI et al., 2009).

2.4 Propriedades mecânicas dos géis de biopolímeros

A fim de desenvolver características desejáveis em produtos como os alimentícios, o conhecimento das propriedades mecânicas dos géis é de grande importância (Coltro *et al.*, 2005). Para muitos materiais poliméricos, o ensaio simples de tensão-deformação é empregado para caracterização de alguns desses parâmetros mecânicos. As características mecânicas dos polímeros, em sua maioria, são muito sensíveis à taxa de deformação, à temperatura e às condições do ambiente (presença de água, solventes orgânicos etc.) (Callister, 2013). A tensão de ruptura é caracterizada pela força à qual um corpo acaba por se partir dividida pela área da secção submetida à tração, enquanto a deformação de ruptura refere-se ao alongamento máximo do objeto antes de se partir. O módulo de Young, ou módulo de elasticidade diz respeito à rigidez do material que é obtido por uma relação entre as duas propriedades anteriores, podendo essa relação ser linear ou não.

2.5 Redes Neurais

Redes neurais possuem esse nome por fazerem uma analogia ao neurônio humano. Nasceram do estudo e esforços de Warren McCulloch e Walter Pitts, um psiquiatra e um matemático, respectivamente. Tiveram como objetivo o desenvolvimento de uma rede que teria uma capacidade de processamento análoga ou semelhante aos neurônios encontrados no cérebro humano (Haykin, 2009).

Sua estrutura pode ser dividida em três partes, ou três camadas. A primeira camada da rede neural é denominada a camada de entrada, onde são inseridos os dados que serão levados para as próximas camadas, não realizando nenhum tipo de cálculo. A segunda camada é denominada de intermediária, onde os dados recebidos pela camada de entrada serão tratados e processados. A forma como esses dados são processados nessa camada não são disponíveis ao usuário da rede. A última camada é denominada de saída. Ela possui esse

nome por apenas apresentar os resultados dos dados processados pela camada anterior (Kim, 2017).

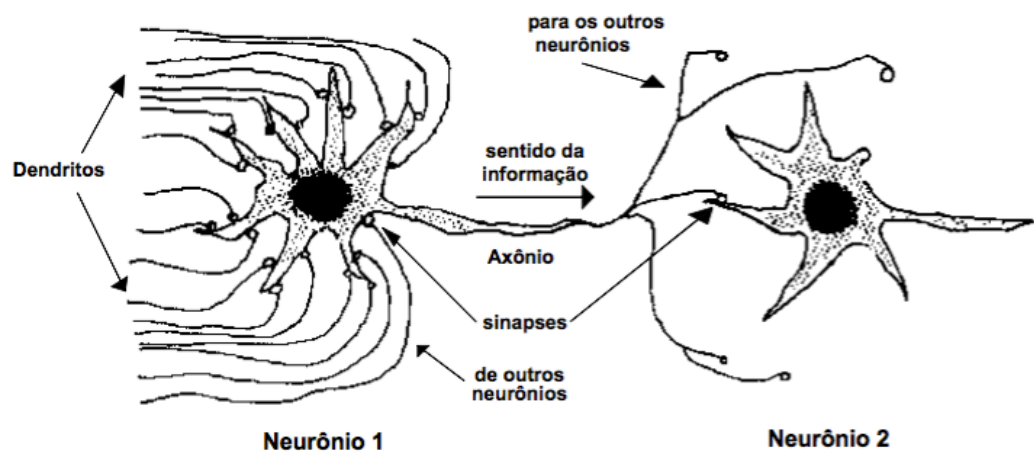
Warren e Walters conseguiram desenvolver uma ferramenta com uma capacidade de aprendizado para diferentes variáveis de uma base de dados (Braga *et al.*, 2007), tornando a rede capaz de obter resultados provindos de situações complexas. Essa propriedade consegue fornecer inúmeros fatores que beneficiam a utilização de redes neurais nas mais diversas áreas do conhecimento fornecendo muitos benefícios (Haykin, 2007):

- Adaptabilidade: uma mesma rede consegue ser retreinada para se adequar a alguma modificação no ambiente, além de ser projetada para se alterar ao encontrar tais modificações;
- Tolerância a falhas: ao perder um neurônio a rede não deixa de funcionar ou se degrada de forma rápida, podendo ainda processar dados e não comprometendo a rede global;
- Não linearidade: uma rede neural pode consistir de neurônios lineares e não lineares, o que favorece na resolução de problemas, já que a propriedade não linear de um neurônio pode tornar toda uma rede não linear.

2.5.1 Redes neurais e o neurônio biológico

O cérebro humano é um órgão onde são recebidas as informações do ambiente, as quais são percebidas e utilizadas como base para a tomada de decisões. Esse órgão é formado por um conjunto de neurônios que se conectam entre si, passando informação de um para outro por meio de sinapses entre o dendrito e os terminais do axônio. Graças a essa rede de neurônios presente nesse órgão, ele é capaz de perceber modificações no ambiente e gerar respostas a partir dela. O conhecimento que temos hoje sobre essa gigante rede foi possível graças ao cientista Ramón y Cajal (1911), pois foi ele o pioneiro do conceito neurônio como é conhecido até os dias atuais (Haykin, 2007). A Figura 1 demonstra a estrutura do neurônio biológico.

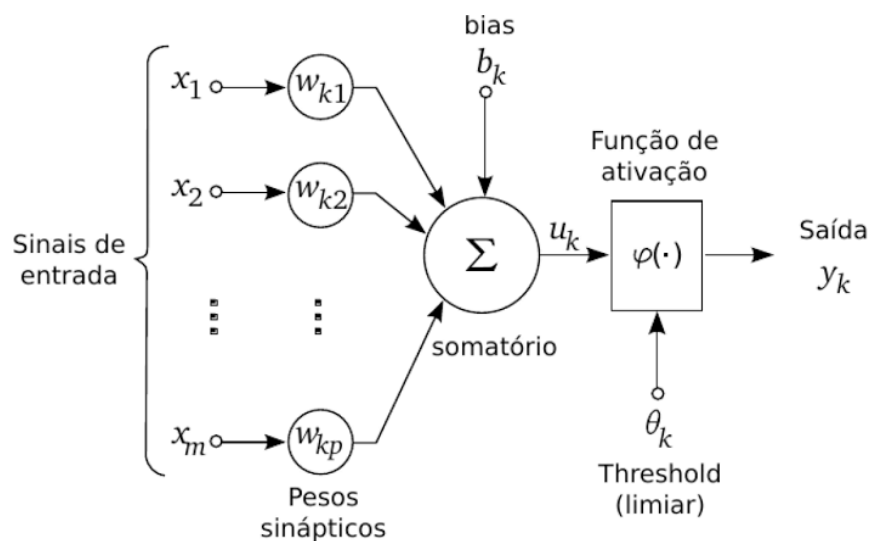
Figura 1: Estrutura básica de um neurônio



Por meio dos dendritos, o neurônio recebe um sinal, onde é mandado diretamente para o seu corpo celular (axônio) até os seus terminais. Esses terminais, ligados a outro dendrito por meio de sinapses, repassa o sinal adiante. Dessa forma, tanto o sinal quanto a resposta a um estímulo são propagados pelo corpo humano, onde será gerado posteriormente um estímulo em resposta ao sinal recebido (Haykin, 2007)

Apesar de não possuir a complexidade do cérebro humano, a rede neural pode ser comparada de forma análoga ao seu funcionamento, assim como os neurônios artificiais (Haykin, 2009). O modelo de um neurônio artificial se encontra demonstrado na Figura 2.

Figura 2: Modelo de Neurônio Artificial (Haykin, 2009)



O seu funcionamento é muito similar ao neurônio biológico, já que é possível separar o neurônio artificial da mesma maneira que o biológico, analisando assim as funções de cada uma das divisões. O primeiro conjunto são grupos de conexões, onde cada uma possui sua respectiva força. A segunda divisão é um somatório dos sinais de forma ponderada. Por fim, o terceiro e último elemento do neurônio artificial é uma função que restringe a amplitude do sinal de saída em um dado intervalo (Haykin, 2009)

2.5.2 Redes Neurais como ferramenta computacional

Em termos matemáticos, o neurônio artificial pode ser descrito com duas equações. A primeira seria uma função somatório sendo escrita de acordo com a Equação 1.

$$u_k = \sum_{j=1}^n w_{kj} x_j \quad (1)$$

A segunda é escrita de acordo com a Equação 2.

$$y_k = \varphi(u_k + b_k) \quad (2)$$

Onde:

w_{kj} = o peso sináptico do neurônio;

u_k = saída do combinador linear ou do somatório;

b_k = bias, considerado um parâmetro externo ao neurônio k;

$\varphi(\)$ = função de ativação;

y_k = sinal de saída do neurônio k.

A função de ativação pode ser descrita de diferentes formas. Pode ser identificada por até três formas básicas (Haykin, 2007). A primeira forma, considerada de *limiar*, onde a saída do neurônio assume o valor de 1, se $(u_k + b_k)$ for positivo, e 0 se for negativo. O segundo modelo é denominado de *Função Linear por Partes*, onde a função é igual a 1 caso a soma da saída do somatório com o bias (campo local induzido) seja maior que 0,5, igual a 0

se o campo local induzido for menor ou igual a -0,5, e assume o valor do campo caso esteja entre esses limites. Por fim, outra forma é a *Função Sigmóide*, bastante utilizada como função de ativação, sendo uma função crescente, limitando-se a duas assíntotas horizontais (Haykin, 2007). Os gráficos que ilustram os comportamentos da função de ativação em sua forma *Limiar*, *Linear por Partes* e *Sigmóide* estão representados pelas Figuras 3,4 e 5, respectivamente.

Figura 3: Função de ativação Limiar (Haykin, 2007)

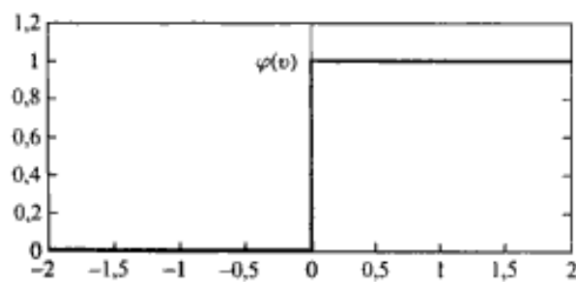


Figura 4: Função de ativação Linear por Partes (Haykin, 2007)

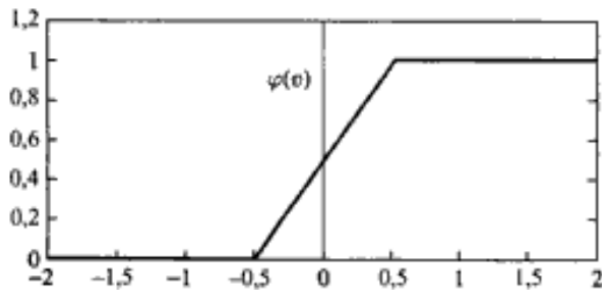
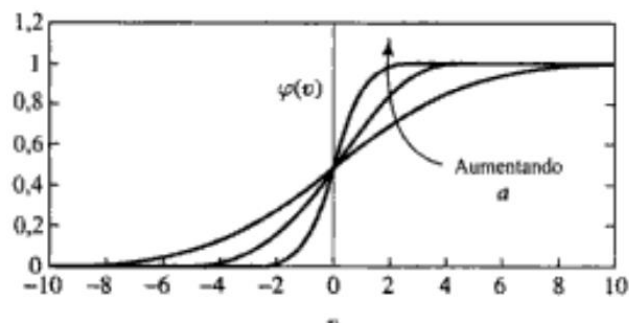


Figura 5: Função de ativação Sigmoidal (Haykin, 2007)



As diferentes formas de estruturação da arquitetura da rede e também as distintas formas da função de ativação de um único neurônio fornecem às redes neurais uma capacidade muito ampla para resolver problemas ou prever cenários de um modo geral, sejam as situações complexas ou não. Dessa forma, diversos métodos de utilização de RNAs podem ser utilizados com a finalidade de modelar sistemas e podem ser comparadas a outras técnicas de modelagem. Isso ocorre, pois, as técnicas mais clássicas de modelagem utilizam de métodos que linearizam sistemas não-lineares antes, o que não é muito eficaz para muitos sistemas reais. Esse empecilho não se aplica às RNAs que conseguem não só modelar sistemas não-lineares sem utilizar da abordagem de linearização, mas também conseguem processar um grande número de variáveis (Braga *et al.*, 2000).

O grande desafio encontrado ao se projetar uma rede neural é entender quais os pesos mais adequados para o problema em questão. Os ajustes desses pesos sinápticos ajudam a formar um algoritmo de aprendizagem para a rede neural, o qual irá “treinar” a rede. A aprendizagem da rede pode ser descrita como um processo onde a rede sofre adaptações em seus parâmetros devido a sinais recebidos do ambiente em que está inserida (Haykin, 2007).

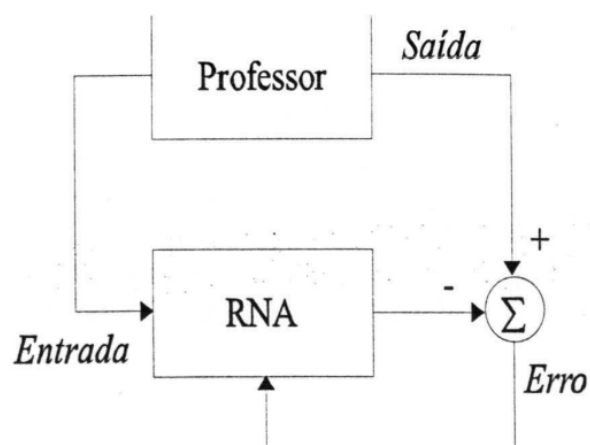
2.5.3 Métodos de Otimização

O treinamento de uma RNA e seu processo de aprendizagem é o que torna essa ferramenta tão versátil. Antes de conseguir designar a tarefa proposta inicialmente, uma rede neural deve passar por um processo de aprendizagem, com a finalidade de melhor se ajustar ao problema. Levando isso em conta, é possível separar os métodos de treinamento de

aprendizagem em dois grupos: 1) métodos supervisionados e 2) métodos não supervisionados (Braga *et al.*, 2000).

O método supervisionado se chama dessa maneira pela necessidade de um agente externo fornecer as informações de entrada e de saída na RNA. A rede realiza comparações com os valores de saída desejados, ajustando os pesos de entrada para cada vez mais minimizar os erros e se aproximar do valor fornecido. Apesar de ser um método muito comum, ainda possui certas desvantagens por necessitar de um agente externo que forneça entradas e saídas, pois, sem isso, a rede não consegue se adaptar (BRAGA *et al* 2000). O mecanismo para o método supervisionado está ilustrado pela Figura 6.

Figura 6: Esquema de aprendizado supervisionado (Braga, 2000).



No método não supervisionado não existe a necessidade de fornecimento dos dados de saída, apenas dos dados de entrada. Este tipo de método só pode se tornar possível se as entradas inseridas na RNA forem coerentes uma com as outras, caso contrário o método se torna inviável. Este método pode ser feito de diversas formas, um importante é o aprendizado hebbiano. Essa forma não supervisionada consiste na comparação que um neurônio artificial de um lado da rede exerce sobre a ativação de outro. De acordo com Haykin (2007), o aprendizado hebbiano possui características temporais e interativas para o neurônio, ou seja, dependem de quando o neurônio realiza a sinapse e depende dos dois lados dela também.

Outro método bastante utilizado é a forma não supervisionada competitiva. Como sugere o nome, os neurônios de saída da RNA passam a disputar entre si com o intuito de

serem ativados. Os neurônios de saída estão ligados diretamente com as unidades de entrada, de forma que sempre que uma saída é ativada, muda o peso da entrada, favorecendo a vitória da unidade ativada, o que a deixará cada vez mais forte e inibindo as outras unidades de saída (Braga *et al.*, 2000).

Uma aprendizagem que pode ser destacada é pelo método de Boltzmann. Nesse método, os neurônios operam de forma binária, assumindo um valor de 1 para um neurônio ativado e -1 para um desativado (Haykin, 2007). Uma rede que funciona com esse método é dividida em grupos de neurônios visíveis (podem ser fixados a um estado ou livres) e neurônios ocultos (funcionam livremente na rede sem estarem presos). Os neurônios de Boltzmann associam uma função de energia, que dependendo do seu valor, influencia na função energia de outro neurônio, fazendo com que cada unidade da rede impacte tanto diretamente quanto indiretamente em outra unidade (Goodfellow *et al.*, 2016).

2.5.4 Aplicações das RNAs

A aplicação de redes neurais já foi empregada com sucesso na modelagem de propriedades mecânicas de géis proteicos. He e Mu (2013) utilizaram RNAs para prever a textura de géis advindos da proteína do soro do leite induzida por alta pressão hidrostática. Para obtenção de propriedades físicas do gel na forma de saídas de interesse, foram inseridos na camada de entrada valores de pressão, concentração de proteína e concentração de açúcar. Assim, a rede com múltiplas camadas utilizada permitiu a obtenção de bons resultados, apresentado por um erro quadrático médio baixo ($MSE < 0,05$) e um coeficiente de regressão ($R^2 > 0,99$) entre dados verdadeiros e previstos em todos os casos. Esses resultados demonstram a aplicação das redes neurais como uma alternativa viável e prática na busca de resultados confiáveis para a previsibilidade de dados em forma de uma série de saídas de interesse.

O presente trabalho tem como objetivo o aprimoramento e aprofundamento dos resultados obtidos ao longo da iniciação científica, realizada pela discente Beatriz durante os anos de 2016 e 2017. O trabalho então realizado consistiu na obtenção de uma RNA composta por uma única camada intermediária que previsse os mesmos valores de tensão na ruptura,

deformação na ruptura e módulo de Young. Para isso, foram testadas diversas estruturas com diferentes números de neurônios a fim de se obter a melhor rede.

A rede neural mais eficaz encontrada foi a de configuração 5-20-3. Nessa rede contendo uma única camada oculta, os valores de R^2 foram os mais próximos de 1 e com o menor valor de função objetivo, que é a diferença quadrática entre o valor experimental e o calculado pela RNA. A aplicação das redes neurais na modelagem matemática das propriedades mecânicas-estruturais de géis de proteína e polissacarídeos se mostrou vantajosa ao apresentar bons resultados de maneira rápida, prática e precisa.

O treinamento da rede se mostrou efetivo para a previsibilidade de valores do módulo de Young e tensão na ruptura. Os erros mais significativos encontrados pela rede foram para os menores valores dos dados de saída. Assim, por meio do presente trabalho, espera-se que a utilização de mais de uma camada intermediária, bem como a variação nos algoritmos utilizados no software Matlab ® 2015, aprofunde os estudos na tentativa de melhorar os resultados obtidos anteriormente. Além do algoritmo Levenberg-Marquardt, utilizado ao longo da iniciação científica, serão utilizados os métodos de Back-Propagation, Resilient Back-Propagation e Powell.

2.5.5 Função objetivo

Ao longo do treinamento o programa analisa a função objetivo, que neste trabalho será a diferença quadrática entre o valor experimental e o calculado pela RNA. As funções objetivo são utilizadas para se medir o desempenho alcançado pela rede neural após o treinamento, já que quanto mais próximas de zero estiverem, melhor é a rede neural. A média dos erros quadráticos pode ser obtida simplesmente dividindo a soma dos erros quadráticos experimentais e simulados pela RNA ($h_{j,exp}$ e $h_{j,RNA}$, respectivamente) pelo número total de dados (n), como é visto pela Equação (3).

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (h_{j,exp} - h_{j,RNA})^2 \quad (3)$$

3 MATERIAIS E MÉTODOS

Foram utilizadas redes neurais que possuíam uma e duas camadas intermediárias variando sua função de ativação entre a tangente sigmoidal e a tangente hiperbólica. Utilizou-se como software o MatLab ® 2015, realizando as simulações na toolbox de RNA que o programa proporciona. Para auxiliar no treinamento da Rede os algoritmos escolhidos foram o de Levenberg-Marquadt, o método de Bayesian Regularization e Conjugate Gradient with Powell/Beale Restarts.

Com a finalidade de obter melhores resultados a camada intermediária sofreu alterações em relação ao seu número de neurônios além de serem testados os diferentes algoritmos nas configurações da rede. O objetivo disso foi realizar comparações dos resultados que cada rede neural proporciona para assim definir a melhor RNA para o estudo proposto. A Figura 7 exemplifica a estrutura de RNAs simuladas durante o estudo para uma camada intermediária, enquanto a Figura 8l exemplifica para duas camadas.

Figura 7: Estrutura de rede neural com 5 variáveis de entrada, uma camada intermediária e 3

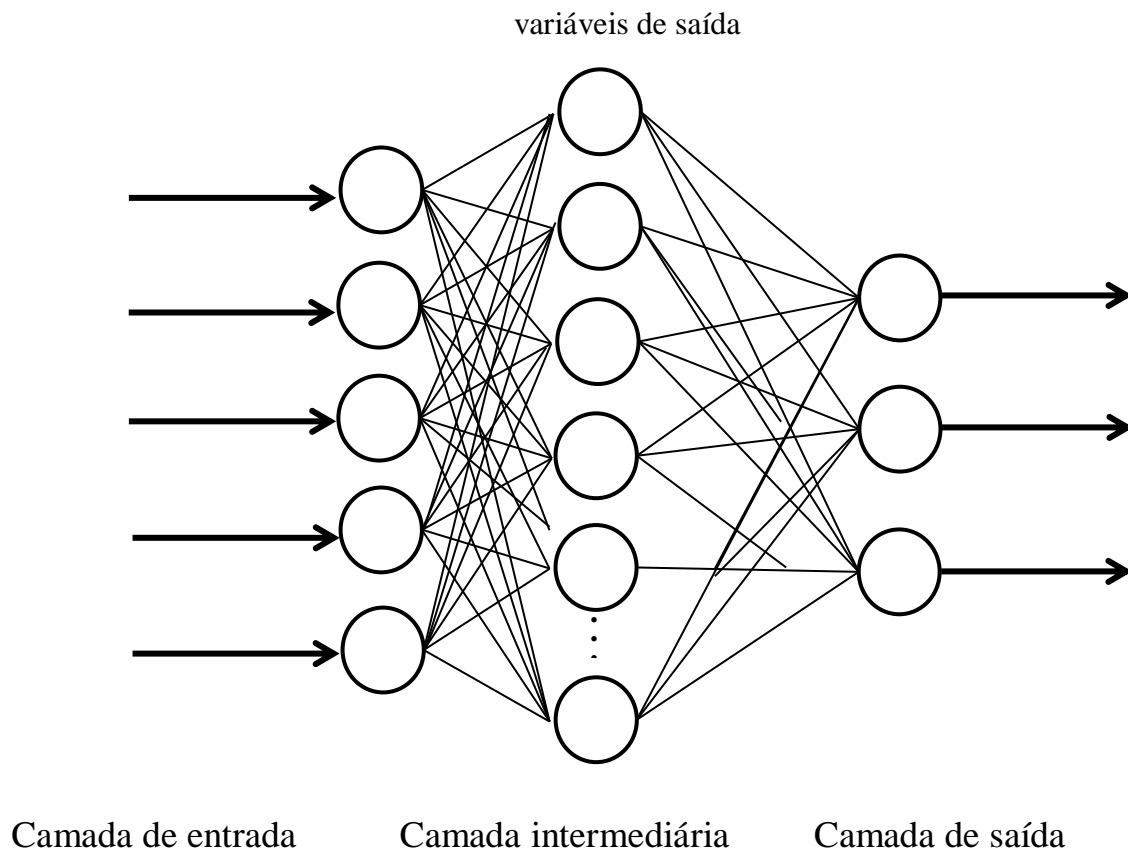
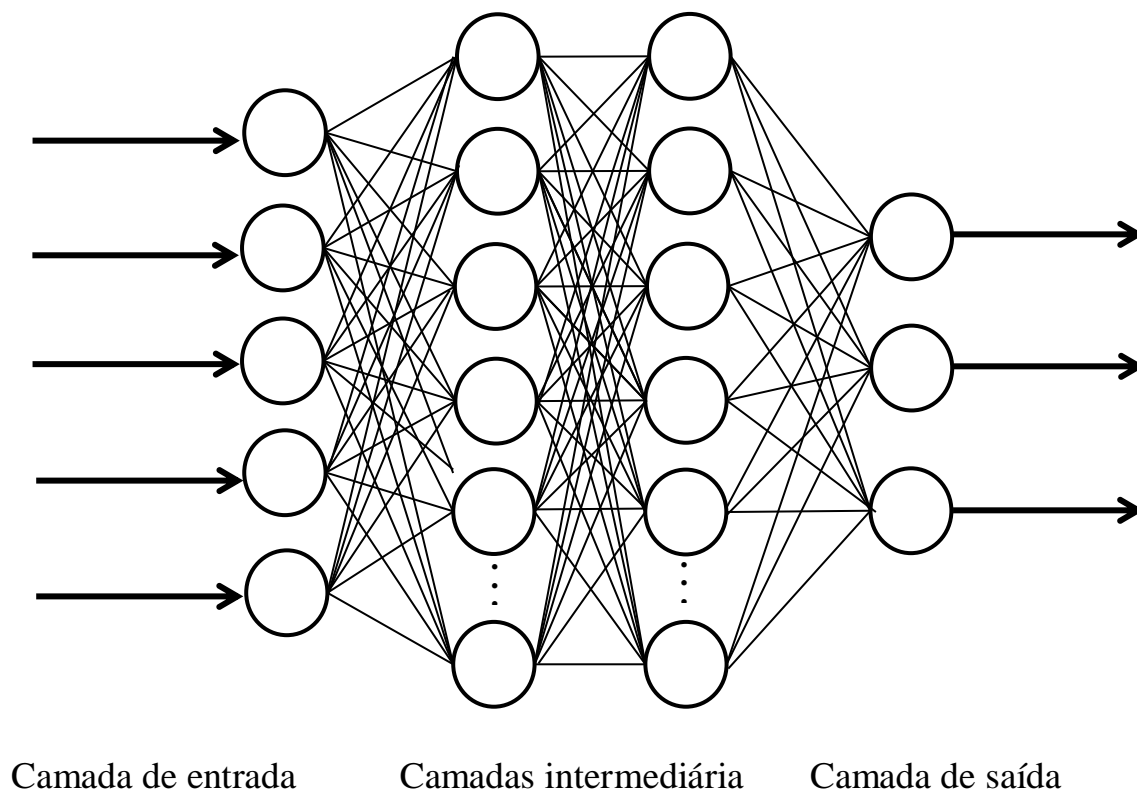


Figura 8: Estrutura de rede neural com 5 variáveis de entrada, duas camadas intermediária e 3 variáveis de saída.



Considerou-se como variáveis de entrada a concentração de caseinato de sódio, concentração do polissacarídeo, temperatura de gelificação do GLD, razão GLD/caseinato e o tipo de polissacarídeo, sendo eles goma jataí (LGB), insulina e carragena. Os três tipos de polissacarídeos receberam uma nomenclatura numérica de 0 a 3 para serem utilizados como variável de entrada, sendo: 0 para sem polissacarídeo, 1 para insulina, 2 para carragena e 3 para LGB. Todos os dados experimentais foram baseados em artigos científicos de um mesmo grupo de pesquisa, os quais utilizaram o mesmo equipamento e mesma metodologia para análise das propriedades mecânicas dos géis (Ribeiro *et al.*, 2004; Braga *et al.*, 200; Perrechil *et al.*, 2009; Picone *et al.*, 2011).

Em todos os sistemas estudados, as propriedades mecânicas foram obtidas sob compressão uniaxial a 80% de deformação e velocidade de compressão de 1 mm/s. Os valores para os dados de entrada podem ser vistos na Tabela 1.

Tabela 1: Dados experimentais utilizados como variáveis de entrada

Concentração proteína (%)	Concentração carboidrato (%)	Tipo carboidrato	Temperatura (°C)	Razão GDL/caseinato
2	0	0	10	0,14
2	0	0	10	0,16
2	0	0	10	0,18
4	0	0	10	0,14
4	0	0	10	0,16
4	0	0	10	0,18
5	0	0	10	0,135
6	0	0	10	0,14
6	0	0	10	0,16
6	0	0	10	0,18
1,5	3	1	10	0,135
2,2	0,9	1	10	0,135
2,2	5,1	1	10	0,135
4	0	1	10	0,135
4	3	1	10	0,135
4	3	1	10	0,135
4	3	1	10	0,135
4	6	1	10	0,135
5,8	0,9	1	10	0,135
5,8	5,1	1	10	0,135
6,5	3	1	10	0,135
0	0,2	2	6	0,18
0	0,2	2	6	0,173
0	0,2	2	6	0,16
0	0,65	2	6	0,18
0	0,65	2	6	0,173
0	0,65	2	6	0,16
0	0,9	2	6	0,18
0	0,9	2	6	0,173
0	0,9	2	6	0,16
2	0,65	2	65	0,16
4	0,475	2	52,5	0,16
4	0,475	2	52,5	0,16
4	0,475	2	77,5	0,16
4	0,475	2	77,5	0,16
4	0,825	2	52,5	0,16
4	0,825	2	52,5	0,16
4	0,825	2	77,5	0,16
4	0,825	2	77,5	0,16
5,78	0	2	6	0,18
5,78	0	2	6	0,18

Concentração proteína (%)	Concentração carboidrato (%)	Tipo carboidrato	Temperatura (°C)	Razão GDL/caseinato
5,78	0	2	6	0,18
5,78	0,2	2	6	0,18
5,78	0,65	2	6	0,18
5,78	0,9	2	6	0,18
6	0,3	2	65	0,16
6	0,65	2	40	0,16
6	0,65	2	65	0,16
6	0,65	2	65	0,16
6	0,65	2	65	0,16
6	0,65	2	65	0,16
6	0,65	2	65	0,16
6	0,65	2	90	0,16
6	1	2	65	0,16
7,8	0	2	6	0,173
7,8	0	2	6	0,173
7,8	0	2	6	0,173
7,8	0,2	2	6	0,173
7,8	0,65	2	6	0,173
7,8	0,9	2	6	0,173
8	0,475	2	52,5	0,16
8	0,475	2	52,5	0,16
8	0,475	2	77,5	0,16
8	0,475	2	77,5	0,16
8	0,825	2	52,5	0,16
8	0,825	2	52,5	0,16
8	0,825	2	77,5	0,16
8	0,825	2	77,5	0,16
9,82	0	2	6	0,16
9,82	0	2	6	0,16
9,82	0	2	6	0,16
9,82	0,2	2	6	0,16
9,82	0,65	2	6	0,16
9,82	0,9	2	6	0,16
10	0,65	2	65	0,16
3,3	0,12	3	10	0,135
5	0,05	3	10	0,135
5	0,12	3	10	0,135
9,8	0,12	3	10	0,135

Tendo como objetivo a padronização, 70% dos dados experimentais foram utilizados para treinar a rede, 15% para validação e 15% para teste (servindo apenas como um

indicador de performance da RNA). Essa divisão foi feita de forma aleatória. O programa foi treinado e ao longo desse treinamento foi analisada uma função objetivo, a qual indicou as divergências dos resultados simulados com os experimentais. Neste trabalho se utilizou a MSE (Mean Square Error) ou Média dos Erros Quadráticos. A MSE é tida como a diferença quadrática dos erros. O critério adotado foi a minimização da função objetivo. Além disso os dados de entrada e de saída das redes neurais foram normalizados entre -1 e 1 de forma automática pelo programa por meio da Equação (4):

$$X_{norm} = \frac{2(x-x_{min})}{(x_{max}-x_{min})} - 1 \quad (4)$$

Em que:

- X_{norm} : Dado normalizado (entrada ou saída);
- X : Valor da variável;
- X_{min} : Maior valor de entrada ou saída;
- X_{max} : Menor valor de entrada ou saída;

Foram utilizadas como variáveis de saída: tensão de ruptura do gel, deformação na ruptura e módulo de Young. Os valores para os dados de saída podem ser vistos na Tabela 2.

Tabela 2: Dados experimentais utilizados como variáveis de saída

Tensão de ruptura (kPa)	Deformação na ruptura (kPa)	Módulo de Young (kPa)
0,4	0,19	1,5
0,45	0,195	1,45
0,4	0,18	1,5
2,7	0,42	4,5
2,5	0,44	4,4
2,5	0,445	3,9
0,25	0,715	3,65
5,3	0,5	6,4
4,9	0,48	6,95
4,7	0,49	6,4
0,29	0,2	0,77
0,52	0,25	1,29
0,59	0,33	1,97
2,5	0,58	3,41

Tensão de ruptura (kPa)	Deformação na ruptura (kPa)	Módulo de Young (kPa)
2,23	0,55	3,51
2,35	0,56	3,66
2,01	0,5	3,28
3,79	0,55	6,19
4,03	0,58	5,34
6,29	0,63	7,94
0	0	0
0	0	0
0	0	0
5	0,5	6
5	0,5	6
5	0,5	6
12	0,49	12
12	0,49	12
12	0,49	12
31,54	0,64	37,69
39,56	0,67	36,46
33,01	0,68	31,62
40,03	0,62	45,95
41,4	0,61	44,73
66,96	0,61	102,62
69,78	0,62	109,35
64,45	0,66	86,84
61,91	0,62	93,23
1,82	0,45	5,26
1,82	0,45	5,26
1,82	0,45	5,26
55,86	0,555	96,43
61,45	0,535	108,53
67,08	0,558	126,61
30,93	0,58	46,07
45,37	0,65	55,03
45,13	0,59	59,18
48,13	0,64	56,78
46,63	0,61	57,98
42,26	0,55	60,7
54,06	0,64	64,96
49,17	0,59	60,04
45,37	0,5	86,41
3,33	0,56	5,72
3,33	0,56	5,72
3,33	0,56	5,72
37,23	0,571	62,98
55,55	0,433	137,98

Tensão de ruptura (kPa)	Deformação na ruptura (kPa)	Módulo de Young (kPa)
36,87	0,43	91,12
34,33	0,49	64,14
40,35	0,57	57,11
47,63	0,61	63,74
35,65	0,36	117,14
32,72	0,31	133,23
22,49	0,29	97,68
14,79	0,28	68,22
3,23	0,6	5,24
3,23	0,6	5,24
3,23	0,6	5,24
25,85	0,445	58,97
27,42	0,293	104,45
18,1	0,262	84,07
39,63	0,44	101,2
0,32	0,345	5,03
0,56	0,365	11,54
0,43	0,512	8,8
0,62	0,535	13,21

As estruturas das redes foram montadas variando os neurônios das camadas intermediárias em números arbitrariamente em pares. Assim que as redes foram treinadas e os erros minimizados, foram comparados os resultados simulados pela RNA com os dados experimentais. A comparação foi feita analisando os menores valores da Função Objetivo e os maiores valores de R^2 .

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Essa seção apresenta os resultados obtidos e sua análise. Para cada algoritmo utilizado para o cálculo das redes neurais, foram obtidas 135 diferentes estruturas para uma ou duas camadas intermediárias, a partir das quais foram selecionadas as 10 melhores.

4.1 Treinamento das RNAs

Um dos algoritmos de treinamento utilizado no treinamento das RNAs foi o de Levenberg-Marquardt. A Tabela 3 a seguir resume as melhores configurações de rede encontradas para esse algoritmo e segundo as funções de ativação sigmoidal (logsig) e tangente hiperbólica (tansig). Para isso, foram analisadas as funções objetivo (F_{obj}) para as etapas de treinamento, validação e teste. A Tabela 3 resume as mesmas configurações de rede analisando os coeficientes de correlação (R^2) de cada etapa. Em negrito é destacada a melhor configuração encontrada com base nos menores valores de F_{obj} e nos maiores valores de R^2 .

Tabela 3: Funções de ativação e função objetivo de cada etapa da rede com o algoritmo Levenberg-Marquardt.

Estrutura Da RNA	Funções de ativação	F_{obj} trein.	F_{obj} teste	F_{obj} valid.	Número de parâmetros
5-6-3	tansig-tansig	17,1585	12,4312	15,272	57
5-10-3	tansig-tansig	51,4642	5,6919	250,4707	93
5-14-3	tansig-tansig	21,9281	21,5655	2,4807	129
5-28-3	tansig-tansig	13,5617	8,6157	54,7778	255
5-50-3	tansig-tansig	77,8669	22,9635	11,7821	453
5-4-18-3	logsig-logsig-tansig	11,0531	8,8671	9,6929	171
5-5-10-3	tansig-tansig-tansig	3,1894	50,6330	12,6358	101
5-16-12-3	logsig-logsig-tansig	8,1882	8,5236	9,6032	339
5-28-30-3	tansig-tansig-tansig	11,2023	9,2439	8,5762	1131

Tabela 4: Coeficientes de correlação de cada etapa com o algoritmo Levenberg-Marquardt.

Estrutura Da RNA	Tensão de ruptura			Deformação na ruptura			Módulo de Young		
	R ² trein.	R ² teste	R ² valid.	R ² trein.	R ² teste	R ² valid.	R ² trein.	R ² teste	R ² valid.
5-6-3	0,9840	0,9605	0,9905	0,3717	0,6826	0,3729	0,9925	0,9778	0,9778
5-10-3	0,9706	0,9970	0,8405	0,4197	0,5263	0,5664	0,9680	0,9980	0,7288
5-14-3	0,9798	0,9598	0,9993	0,463	0,5554	0,7242	0,9877	0,9923	0,9989
5-28-3	0,9871	0,9918	0,9838	0,0713	-0,2121	-0,0492	0,9936	0,9980	0,9722
5-50-3	0,9180	0,9876	0,9883	0,2426	0,7048	-0,0641	0,9652	0,9923	0,9897
5-4-18-3	0,9874	0,9956	0,9982	0,3461	0,3567	0,1676	0,9942	0,9957	0,9934
5-5-10-3	0,9985	0,9885	0,9672	0,5668	0,7871	0,4761	0,9979	0,9712	0,9971
5-16-12-3	0,9959	0,9962	0,9934	0,2815	0,3435	0,6475	0,9948	0,9957	0,9968
5-28-30-3	0,9945	0,9973	0,9957	0,1626	-0,0674	-0,3373	0,9926	0,994	0,9968

A Tabela 5 a seguir resume as melhores configurações de rede encontradas para o algoritmo de Bayesian Regularization e também segundo as funções de ativação LOGSIG e TANSIG. Para isso, foram analisados os mesmos parâmetros de funções objetivo (F_{obj}) para as etapas de treinamento, validação e teste. A Tabela 8 analisa os coeficientes de correlação (R^2) de cada etapa. Em negrito é destacada a melhor configuração encontrada.

Tabela 5: Funções de ativação e função objetivo de cada etapa da rede com o algoritmo Bayesian Regularization.

Estrutura Da RNA	Funções de ativação	F_{obj} trein.	F_{obj} teste	F_{obj} valid.	Número de parâmetros
5-6-3	tansig-tansig	174,6438	48,124	12,8219	57
5-10-3	tansig-tansig	123,8859	3,3298	21,5215	93
5-14-3	tansig-tansig	106,6102	46,7519	50,4323	129
5-28-3	tansig-tansig	51,5095	71,239	190,4506	255
5-50-3	tansig-tansig	72,5608	21,1202	28,3295	453
5-4-18-3	logsig-logsig-tansig	64,5332	29,8625	17,2859	171
5-5-10-3	tansig-tansig-tansig	46,2806	7,6792	6,8479	101
5-15-15-3	tansig-tansig-tansig	21,5469	46,1643	2,6691	346
5-16-12-3	logsig-logsig-tansig	63,5967	19,4821	81,2709	339
5-28-30-3	tansig-tansig-tansig	89,5502	108,1907	114,1426	1131

Tabela 6: Coeficientes de correlação de cada etapa com o algoritmo Bayesian Regularization.

Estrutura Da RNA	Tensão de ruptura			Deformação na ruptura			Módulo de Young		
	R ² trein.	R ² teste	R ² valid.	R ² trein.	R ² teste	R ² valid.	R ² trein.	R ² teste	R ² valid.
5-6-3	0,9571	0,9959	0,9747	0,5263	0,3439	0,3713	0,8758	0,9812	0,9926
5-10-3	0,9692	0,9974	0,9926	0,4625	0,6446	0,1030	0,9249	0,9986	0,9825
5-14-3	0,8904	0,9881	0,9338	0,4667	0,2026	0,0802	0,9327	0,9784	0,9779
5-28-3	0,9811	0,8866	0,9872	0,246	0,5235	-0,1035	0,9586	0,9736	0,8955
5-50-3	0,9510	0,9824	0,9734	0,2484	0,3152	0,4457	0,9410	0,9908	0,9894
5-4-18-3	0,9423	0,9932	0,9737	0,4941	0,1112	0,5104	0,9626	0,9886	0,9947
5-5-10-3	0,9736	0,9941	0,9965	0,3701	0,6995	0,4622	0,9666	0,9950	0,9976
5-15-15-3	0,9821	0,9668	0,9957	0,3803	-0,0724	0,6606	0,9877	0,9810	0,9992
5-16-12-3	0,9618	0,9886	0,9492	0,1238	0,1999	0,3557	0,9604	0,994	0,9402
5-28-30-3	0,9082	0,9346	0,9091	-0,0761	-0,2498	0,3166	0,9546	0,9375	0,9277

Por fim, a Tabela 7 e a Tabela 8 a seguir resumem as melhores configurações de rede encontradas para o algoritmo de Conjugate Gradient with Powell/Beale Restarts.

Tabela 7: Funções de ativação e função objetivo de cada etapa da rede com o algoritmo

Conjugate Gradient with Powell/Beale Restarts.

Estrutura Da RNA	Funções de ativação	F _{obj} trein.	F _{obj} teste	F _{obj} valid.	Número de parâmetros
5-6-3	tansig-tansig	85,6314	157,1019	37,0313	57
5-10-3	tansig-tansig	49,0470	192,1903	80,8389	93
5-14-3	tansig-tansig	54,5522	13,8796	25,881	129
5-28-3	tansig-tansig	63,6605	91,8083	33,4729	255
5-50-3	tansig-tansig	50,0061	49,9532	35,0003	453
5-4-18-3	logsig-logsig-tansig	178,0142	17,2505	29,5462	171
5-5-10-3	tansig-tansig-tansig	14,9719	156,1479	9,8728	101
5-15-15-3	tansig-tansig-tansig	15,1683	21,3104	11,8314	346
5-16-12-3	logsig-logsig-tansig	45,5055	106,3103	68,9151	339
5-28-30-3	tansig-tansig-tansig	26,8318	132,4233	72,1784	1131

Tabela 8: Coeficientes de correlação de cada etapa com o algoritmo Conjugate Gradient with Powell/Beale Restarts.

Estrutura Da RNA	Tensão de ruptura			Deformação na ruptura			Módulo de Young		
	R ² trein.	R ² teste	R ² valid.	R ² trein.	R ² teste	R ² valid.	R ² trein.	R ² teste	R ² valid.
5-6-3	0,9225	0,8537	0,9533	0,5182	0,2234	0,2629	0,953	0,9182	0,9881
5-10-3	0,9347	0,8294	0,9561	0,1535	0,5673	0,0614	0,9780	0,8678	0,9546
5-14-3	0,9529	0,9885	0,9825	0,4904	-0,0866	0,5534	0,9717	0,9887	0,9632
5-28-3	0,9441	0,9934	0,9827	-0,063	-0,3509	-0,4695	0,9714	0,9692	0,9831
5-50-3	0,9510	0,9704	0,9672	-0,0356	-0,4022	-0,2953	0,9740	0,9709	0,9791
5-4-18-3	0,9288	0,9836	0,9543	-0,0035	0,5168	0,6126	0,8963	0,9844	0,9844
5-5-10-3	0,9839	0,9366	0,9923	0,1057	0,3948	0,3828	0,9915	0,9144	0,9955
5-15-15-3	0,9840	0,9875	0,9863	0,1763	-0,1128	-0,1519	0,9913	0,9933	0,9872
5-16-12-3	0,9559	0,8774	0,979	-0,1383	0,0886	-0,0781	0,9797	0,9345	0,9672
5-28-30-3	0,9544	0,9233	0,9648	0,1337	-0,4268	0,318	0,9853	0,9434	0,984

Analisando as tabelas de maneira geral, note-se que o algoritmo de Levenberg possui um melhor desempenho tanto para uma quanto para duas camadas quando os números de neurônios são maiores, atingindo parâmetros próximos a 300, como demonstrado pela estrutura 5-28-3 e 5-16-12-3. Além disso, observa-se como esse algoritmo de treinamento apresentou resultados bem favoráveis para às variáveis de Tensão de Ruptura e Módulo de Young como a estrutura 5-28-30-3.

Diferente do algoritmo de Levenberg, o algoritmo Bayesian Regularization apresentou um desempenho geral favorável apenas em duas estruturas (5-5-10-3 e 5-15-15-3). Apesar de terem sido separadas as melhores estruturas para esse algoritmo, elas não mostraram resultados muito satisfatórios, apenas em poucos casos. O mesmo pode ser observado quando se utilizou o algoritmo Conjugate Gradient with Powell/Beale Restarts, observando resultados gerais favoráveis nas mesmas estruturas que o algoritmo Bayesian Regularization.

De forma a permitir uma melhor comparação entre os três algoritmos, a melhor configuração de cada um deles destacada em negrito está representada na Tabela 9 e na Tabela 10 a seguir.

Tabela 9: Desempenho das melhores configurações da função objetivo e número de parâmetros para cada algoritmo utilizado.

Algoritmo de treinamento	F _{obj} trein.	F _{obj} teste	F _{obj} valid.	Número de parâmetros
Levenberg-Marquardt	8,1882	8,5236	9,6032	339
Bayesian Regularization	21,5469	46,1643	2,6691	346
Conjugate Gradient with Powell/Beale Restarts	15,1683	21,3104	11,8314	346

Tabela 10: Desempenho das melhores configurações do coeficiente de correlação de todas as etapas para cada algoritmo utilizado.

Algoritmo de treinamento	Tensão de ruptura			Deformação na ruptura			Módulo de Young		
	R ² trein.	R ² teste	R ² valid.	R ² trein.	R ² teste	R ² valid.	R ² trein.	R ² teste	R ² valid.
Levenberg-Marquardt	0,9959	0,9962	0,9934	0,2815	0,3435	0,6475	0,9948	0,9957	0,9968
Bayesian Regularization	0,9821	0,9668	0,9957	0,3803	-0,0724	0,6606	0,9877	0,9810	0,9992
Conjugate Gradient with Powell/Beale Restarts	0,9840	0,9875	0,9863	0,1763	-0,1128	-0,1519	0,9913	0,9933	0,9872

É importante ressaltar que as melhores redes encontradas para cada método de otimização utilizam parâmetros muito próximos uma das outras, apresentando uma performance melhor quando os parâmetros estão na faixa entre 330 e 350 para esse tipo de estrutura (5 entradas e 3 saídas), além de apresentarem resultados ineficazes para quando os parâmetros são muito altos ou muito baixos. Isso demonstra que, apesar de ser uma ferramenta muito versátil, há uma faixa ótima de trabalho para as RNAs, já que grande número de parâmetros e/ou neurônios acaba atrapalhando a rede e um número muito pequeno não é o suficiente para fazer com que ela funcione.

Analisando os três algoritmos utilizados, verifica-se que a rede que apresentou os melhores resultados foi o de Levenberg-Marquardt com uma configuração **5-16-12-3** (duas

camadas intermediárias, sendo a primeira com 16 neurônios e a segunda camada intermediária com 12 neurônios) e os pesos e bias para essa rede encontrados no Apêndice A.

Utilizando essa rede como referência, seus resultados simulados foram dispostos em gráficos para verificar a eficiência de RNAs para o estudo das variáveis de saída (Tensão de ruptura, deformação de ruptura e módulo de Young). As Figuras 9, 10 e 11 apresentam os valores preditos versus os calculados pela RNA para a tensão de ruptura, deformação de ruptura e Módulo de Young respectivamente.

Figura 9: Valores preditos versus simulados pela RNA 5-16-12-3 para a Tensão de Ruptura.

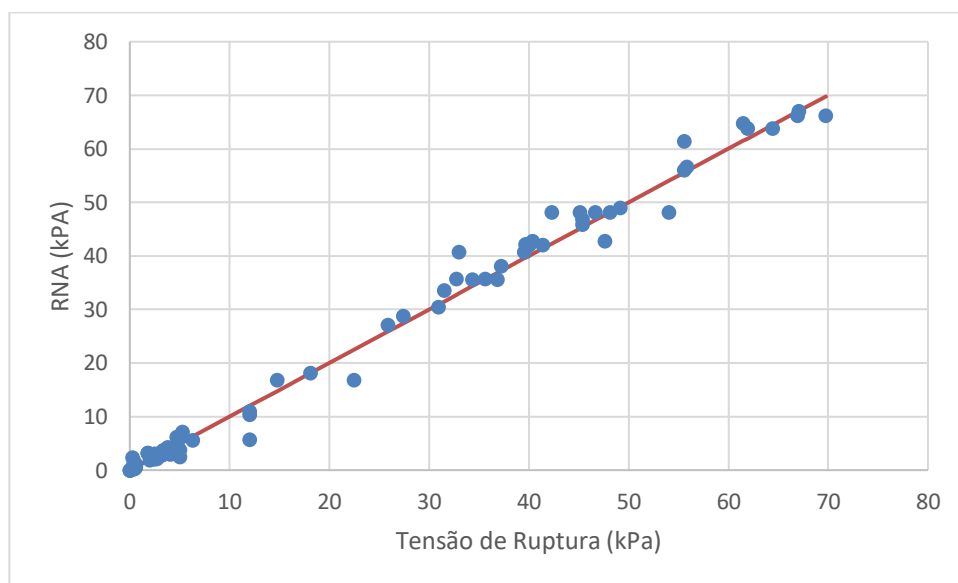


Figura 10: Valores preditos versus simulados pela RNA 5-16-12-3 para a Deformação de Ruptura.

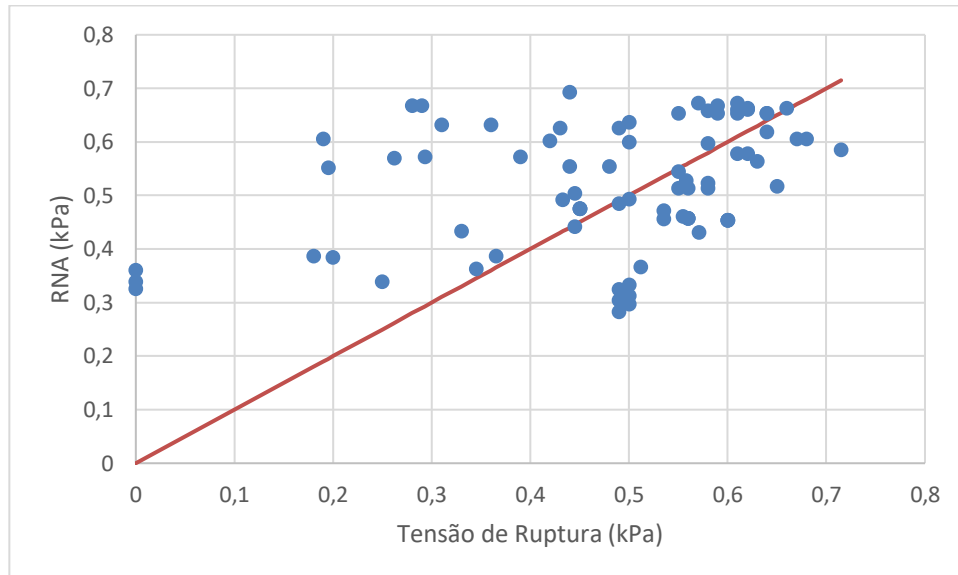
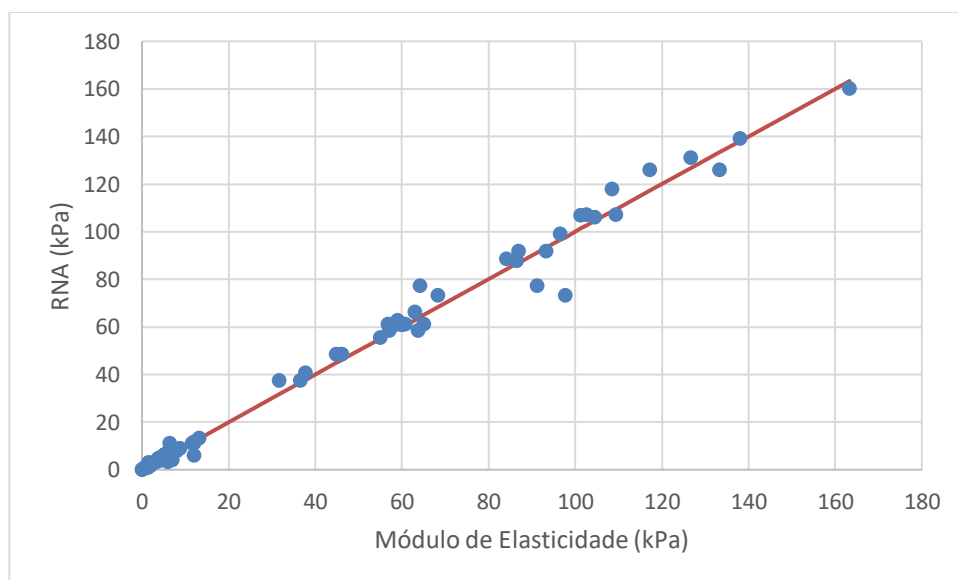


Figura 11: Valores preditos versus simulados pela RNA 5-16-12-3 para a Módulo de Young.



Observa-se, pela análise dos gráficos, que a rede se mostrou muito eficiente para as variáveis de Tensão de Ruptura e o Módulo de Young. Apesar disso, os dados não foram eficazes para a variável Deformação de Ruptura. Antes mesmo dos gráficos serem plotados

foi possível prever a falta de ajuste para a deformação de ruptura observando os valores de R^2 para essa variável em específico, uma vez que todas as redes estudadas apresentaram valores muito baixos e menores que 0,7.

Além disso, para melhorar a avaliação do desempenho dessa rede calculou-se para cada variável os erros relativos, comparando os valores calculados pela RNA e os fornecidos para o treinamento da rede. A Figura 12, Figura 13 e Figura 14 apresentam os erros percentuais para as variáveis de Tensão de Ruptura, Deformação de Ruptura e Módulo de Young.

Figura 12: Erro percentual ponto a ponto da RNA 5-16-12-3 para a variável Tensão de Ruptura.

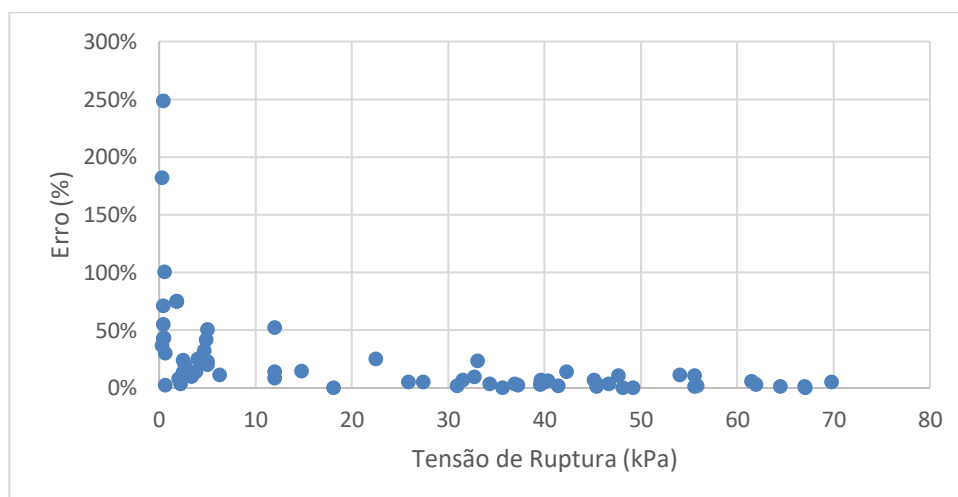


Figura 13: Erro percentual ponto a ponto da RNA 5-16-12-3 para a variável Deformação de Ruptura.

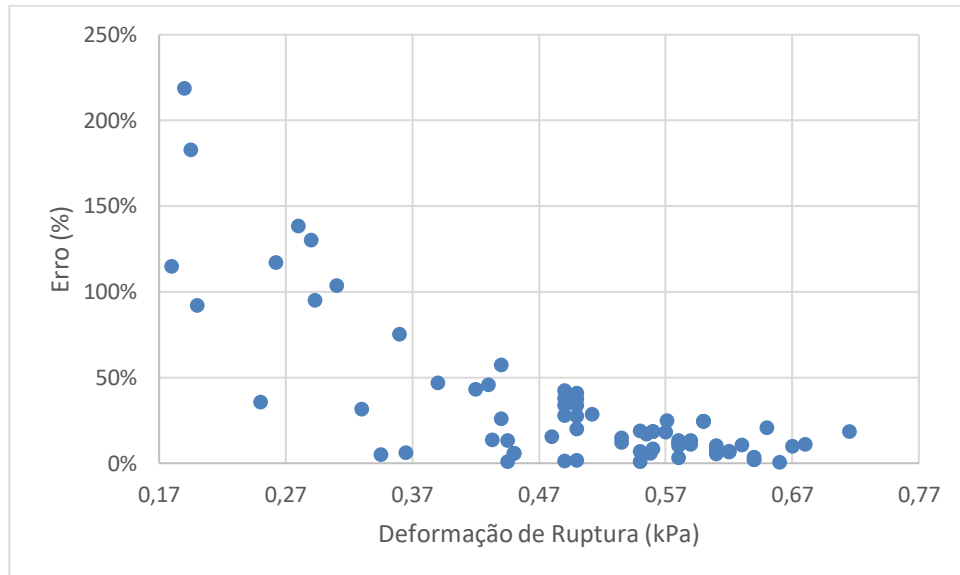
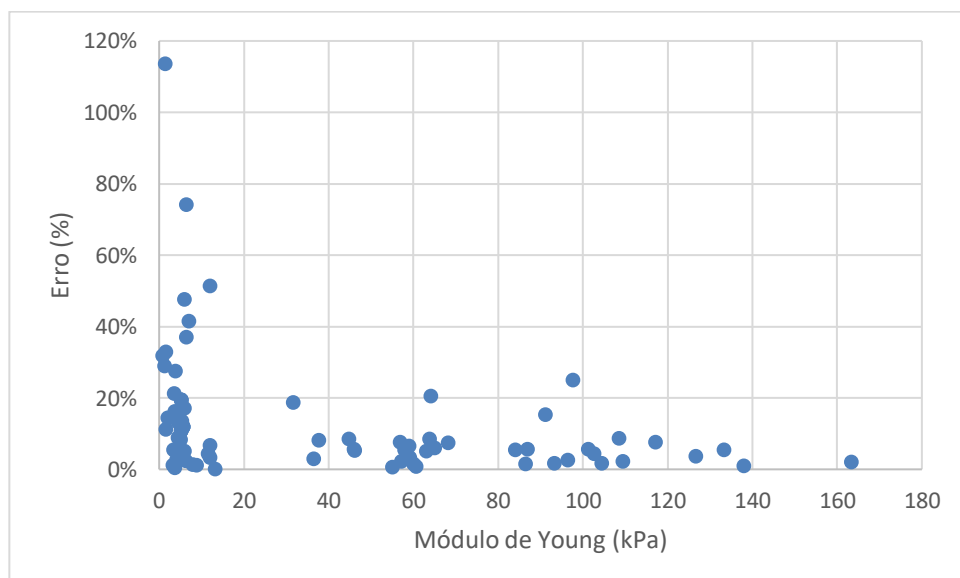


Figura 14: Erro percentual ponto a ponto da RNA 5-16-12-3 para a variável Módulo de Young.



A rede se mostrou bem versátil analisando os erros experimentais, pois analisando ponto a ponto é possível notar que para esse tipo de estudo os erros experimentais foram relativamente baixos, não ultrapassando os 40% na grande maioria dos pontos. Entretanto ainda é fácil de observar pontos nos quais a RNA apresentou resultados muito superiores aos experimentais. Para todas as variáveis a rede neural se mostrou bastante eficiente quanto mais aumentávamos o valor da variável, obtendo erros menores em valores grandes e erros percentuais mais altos quanto mais ela se aproximava do zero. Algo importante a ressaltar é que, observando ponto a ponto, a RNA obteve erros abaixo da linha de 50% para a Deformação de Ruptura. No entanto, como os valores dessa propriedade são muito pequenos, qualquer variação além do predito pode gerar erros grandes e pode ocasionar dados muito fora da linha de predição da RNA.

Ainda, foram calculados os erros médios para cada variável, sendo 23% para a Tensão de Ruptura, 32% para a Deformação de Ruptura e 13% para o Módulo de Young. A RNA realmente não se mostrou efetiva para a Deformação de Ruptura, o pode ter sido causado por uma falta de normalização dos dados, já que todas as variáveis apresentaram erros relativos grandes para valores pequenos de variáveis de entrada. Como os valores fornecidos de Deformação de Ruptura foram todos muito baixos, a rede teve dificuldades em atingir os valores preditos dessa variável em específico, se sobressaindo para as de Tensão de Ruptura e Módulo de Young, as quais possuíam valores mais elevados.

Como a rede não estava sendo muito eficaz para a Deformação de Ruptura, montou-se outras estruturas de RNA com uma saída apenas para assim encontrar qual o modelo que mais se adequa para essa variável. As redes foram montadas utilizando o algoritmo de Levenberg-Marquadt por ter sido o mais eficaz durante o estudo. De forma análoga às tabelas anteriores, a Tabela 11 e a Tabela 12 a seguir resumem as melhores configurações de rede encontradas para esse algoritmo e segundo as funções de ativação LOGSIG e TANSIG, levando em consideração os menores valores de F_{obj} e os maiores valores de R^2 . Em negrito é destacada a melhor configuração encontrada com base nas considerações.

Tabela 11: Funções de ativação e função objetivo de cada etapa da rede com o algoritmo Levenberg-Marquardt considerando uma única variável de saída (deformação na ruptura).

Estrutura Da RNA	Funções de ativação	F_{obj} trein.	F_{obj} teste	F_{obj} valid.	Número de parâmetros
5-6-1	tansig-tansig	0,0036	4,3321E-04	0,0014	43
5-10-1	tansig-tansig	0,0021	6,5692E-04	7,5241E-04	71
5-14-1	tansig-tansig	0,0025	8,4143E-04	9,8166E-04	99
5-28-1	tansig-tansig	0,0032	9,6561E-04	4,1559E-04	197
5-50-1	tansig-tansig	0,0017	0,0025	0,0035	351
5-4-18-1	logsig-logsig-tansig	7,4638E-04	0,0041	3,1734E-04	133
5-5-10-1	tansig-tansig-tansig	0,0013	0,0019	0,0010	101
5-15-15-1	tansig-tansig-tansig	0,0033	7,7230E-04	0,0019	346
5-16-12-1	logsig-logsig-tansig	0,0054	0,0038	5,41E-04	313
5-28-30-1	tansig-tansig-tansig	0,0055	0,0015	5,2000E-03	1069

Tabela 12: Desempenho das melhores configurações do coeficiente de correlação de todas as etapas considerando uma única variável de saída (deformação na ruptura).

Estrutura Da RNA	Deformação na ruptura		
	R² trein.	R² teste	R² valid.
5-6-1	0,9300	0,9961	0,9676
5-10-1	0,9627	0,9829	0,9846
5-14-1	0,9501	0,9906	0,9332
5-28-1	0,9344	0,9865	0,9934
5-50-1	0,9611	0,9498	0,9582
5-4-18-1	0,9823	0,9438	0,9959
5-5-10-1	0,9706	0,9798	0,9763
5-15-15-1	0,9186	0,9939	0,9008
5-16-12-1	0,8951	0,9524	0,9607
5-28-30-1	0,8801	0,9658	0,9216

De forma a comparar os resultados atingidos pela rede com o predito plotou-se um gráfico de valores preditos versus os simulados e um de erros relativos. A Figura 15 representa o gráfico do predito versus o simulando enquanto a Figura 16 representa o de erro relativo ponto a ponto.

Figura 15: Valores preditos versus simulados pela RNA 5-4-18-1 para a Deformação de Ruptura.

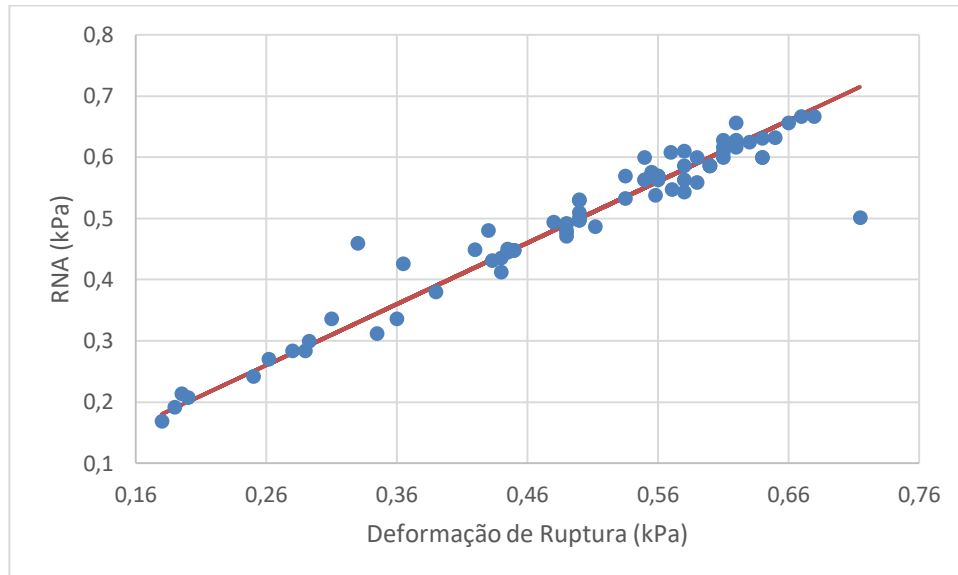
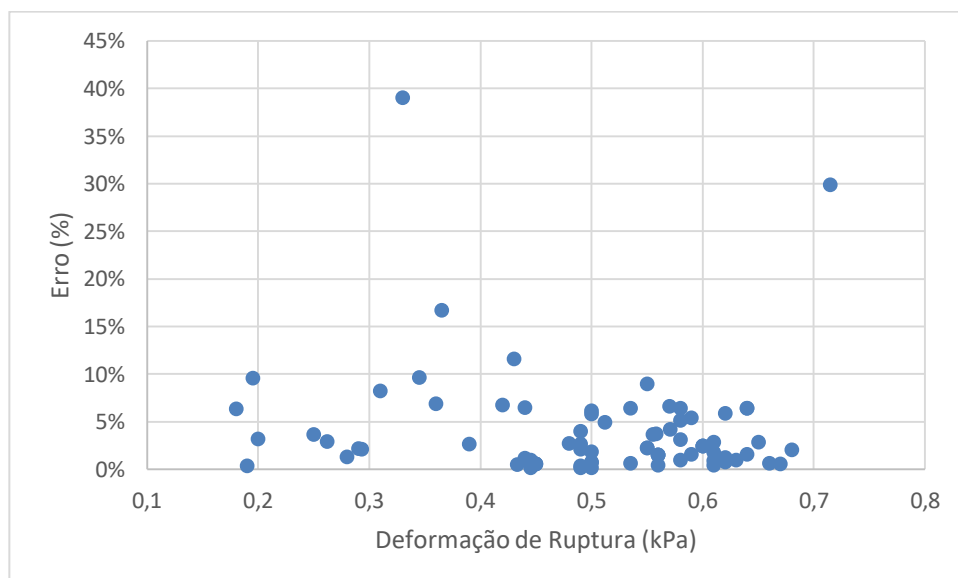


Figura 16: Erro percentual ponto a ponto da RNA 5-4-18-1 para a variável Deformação de Ruptura.



Como demonstrado na Tabela 11 e na Tabela 12, tratando a variável deformação na ruptura de forma isolada foi possível atingir melhores resultados. Como a Deformação de Ruptura era uma variável de valores pequenos em comparação às outras duas variáveis, a RNA acabava por priorizar dados mais condizentes com a Tensão de Ruptura e o Módulo de Young. Isso se deve por conta de as duas variáveis citadas estarem em grandezas semelhantes quando comparadas com a Deformação de Ruptura.

Além disso foi possível observar uma grande melhoria nos resultados analisando os dois gráficos dos resultados simulados e do erro relativo. Nota-se como para uma rede apenas para uma variável os erros relativos obtidos foram bem menores do que os atingidos anteriormente para uma rede com 3 saídas, atingindo valores médios de aproximadamente 4 a 5 por cento.

Importante notar como para todos os casos apresentados RNAs de duas camadas apresentaram resultados mais satisfatórios comparados a uma camada. Isso se deve ao fato do tipo de algoritmos de otimização e de treinamento da rede. O método supervisionado de treinamento da rede faz com que sempre ocorra uma comparação entre os valores da camada de saída da RNA com os fornecidos para a rede. É então calculado um erro e os pesos e bias das unidades acabam se ajustando para os neurônios artificiais. Essa “correção” acaba sendo mais eficiente para uma rede de duas camadas do que de uma, já que ocorrem um maior número de modificações para melhor se ajustar aos dados preditos de saída.

5 CONCLUSÃO

Neste trabalho, foram testados 3 diferentes algoritmos com uma ou duas camadas intermediárias para que se pudesse obter a previsibilidade das propriedades mecânicas de géis de caseinato de sódio via redes neurais artificiais. Para isso, foram treinadas diversas redes e selecionadas as 10 melhores obtidas para cada algoritmo.

Os melhores resultados foram os apresentados pelo algoritmo de Levenberg-Marquardt com uma configuração 5-16-12-3 (duas camadas intermediárias, sendo a primeira com 16 neurônios e a segunda camada intermediária com 12 neurônios). O critério utilizado foi os menores valores da função objetivo e os valores de R^2 foram mais próximos de 1. Importante ressaltar que as redes com duas camadas intermediárias apresentaram melhores resultados quando comparados a uma única camada.

Para todas as variáveis de saída, a melhor configuração de rede neural se mostrou bastante eficiente quanto mais aumentávamos o valor da variável, obtendo erros menores em valores grandes e erros percentuais mais altos quanto mais ela se aproximava do zero. Para a variável de saída Deformação na Ruptura, entretanto, esses erros foram maiores ao se comparar com os valores de erro de Tensão na Ruptura e Módulo de Young. Por isso, optou-se por treinar uma rede com essa variável de forma separada, de forma a se obter melhores resultados. Tratando uma variável de forma isolada, foi possível atingir resultados mais satisfatórios, com valores de função objetivo menores e R^2 mais próximos de 1.

A aplicação das redes neurais na modelagem matemática das propriedades mecânico-estruturais de géis de proteína e polissacarídeos se mostrou vantajosa ao apresentar bons resultados de maneira rápida, prática e precisa, além de representar uma alternativa a métodos convencionais. Além disso, esse tipo de modelagem permite a avaliação simultânea de diferentes variáveis, sendo uma ferramenta com elevado potencial para aplicação em sistemas alimentícios complexos.

Para trabalhos futuros seria interessante realizar estruturas novas estruturas de redes neurais, porém apenas com as variáveis de saída Tensão de Ruptura e Módulo de Young. Possivelmente uma estrutura mais adequada para essas duas propriedades surgiria desse

estudo. Além disso, de forma a encontrar a melhor RNA para cada variável é interessante também montar novas estruturas para cada variável separadamente ou até mesmo utilizar novos algoritmos de treinamento, de forma que torne a comparação entre as estruturas mais rica e assim se possa encontrar a melhor rede neural para as propriedades estudadas.

6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BOUNOUS, G.; KONGSHAVN, P.A.L.; TAVEROFF, A.; GOLD, P. Evolution traits in human milk proteins. **Medical Hypothesis**, v.27, p.133-140, 1988.

BRAGA, A. L. M.; CUNHA R. L. The effect of the glucono- δ -lactone/caseinate ratio on sodium caseinate gelation. **International Dairy Journal**, v. 16, p.389-398, 2006.

BRITO, G. F.; AGRAWAL, P.; ARAÚJO, E. M.; MELO, T. J. A. Biopolímeros, polímeros biodegradáveis e polímeros verdes. **Revista Eletrônica de Materiais e Processos**, v. 6, n. 2, p. 127-139, 2011.

CALLISTER JR., W. D.; RETHWISCH, D. G. **Ciência e Engenharia dos Materiais: Uma Introdução**. LTC, v. 8, 2013.

CAVALLIERI, A. L. F.; CUNHA R. L. The effects of acidification rate, pH and ageing time on the acid cold set gelation of whey proteins. **International Dairy Journal**, v.22, p.439-448, 2008.

COLTRO, L.; SARANTÓPOULOS, C. I. G. L.; JÚNIOR, I. A. J. **Biopolímeros usados em embalagem: propriedades e aplicações**. Anais do VIII Congresso Brasileiro de Polímeros, p. 413–419, 2005.

CUI, W.; WU, Y.; ESKIN, N. A. M.; GOFF, H. D. **An investigation of four comercial galactomannans on their emulsion and theological properties**. Food Research International, v. 42, n. 8, p. 1141-1146, 2009.

CUNHA P. L. R.; PAULA, R. C. M.; FEITOSA, J. P. A.. Polissacarídeos da biodiversidade brasileira: uma oportunidade de transformar conhecimento em valor econômico. **Quím. Nova**, v. 32, no. 3, 2009.

DELLO, S. M.; BERTOLA, N.; MARTINO, M.; BAVILACQUA A. Influence of dietary fibre addition on sensory and rheological properties of yogurt. **International Dairy Journal**, v. 14, p. 263-268, 2004.

DOUBLIER, J. -L., GARNIER, C., RENARD, D., & SANCHEZ, C. Protein-polysaccharide interactions. **Current Opinion in Colloid and Interface Science**, v. 5, p. 202–214, 2000.

FOUCQUIER, J.; CHANTOISEAU, E.; LE FEUNTEUN, S.; FLICK, D.; GAUCEL, S.; PERROT, N. Toward an integrated modeling of the dairy products transformations, a review of the existing mathematical models. **Food Hydrocolloids**, v. 27, p. 1-13, 2012.

GOZZO, A. M.; CUNHA, R. L.; MENEGALLI, F. C. Viscosidade extensional e em cisalhamento de suspensões acidificadas de amido de amaranto e caseinato de sódio. **Ciência E Tecnologia De Alimentos**, v. 29, n. 3, p. 587 - 596, 2009.

HE, J.; MU, T. Application of an Artificial Neural Network for Predicting the Texture of Whey Protein Gel Induced by High Hydrostatic Pressure. **CCTA2012: Computer and Computing Technologies in Agriculture VI**, p. 118-125, 2013.

HAYKIN, S. **Redes Neurais: Princípios e Prática**, Artmed, 2007.

KIM, P. **MATLAB Deep Learning: With Machine Learning, Neural Networks and Artificial Intelligence**. Apress, 2017.

KASAPIS, S. Recent advances and future challenges in the explanation and exploitation of the network glass transition of high sugar/biopolymer mixtures. **Critical Reviews in Food Science and Nutrition**, v.48, p. 185–203, 2008.

KIM, Y.; WANG, S. S. Kinetic study of thermally induced inulin gel. **Journal of Food Science**, v.66, p.991-997, 2001.

KIM, Y.; FAQIH, M. N.; WANG, S. S. Factor affecting gel formation of inulin. **Carbohydrate Polymers**, v. 46, p.135-145, 2001.

KLASSEN, T. **Uso de redes neurais artificiais para a modelagem da temperatura e da retenção de água no processo de resfriamento de carcaças de frango por imersão.** Dissertação (Mestrado em Engenharia Química), Universidade Estadual do Oeste do Paraná, 2008.

LÓREN, N.; HERMANSON, A. M. **Phase separation and gel formation in kinetically trapped gelatin/maltodextrin gels.** *Int. J. Biol. Macrom.*, v.27, p.249-262, 2000.

MARZZOCO, A.; BAPTISTA B. **Bioquímica Básica.** 2015

OHR, L. M. Nutraceuticals and functional foods. **Food technology**, v. 58, p.71-25, 2004.

PERRECHIL, F. A.; BRAGA, A. L. M.; CUNHA, R. L. Interactions between sodium caseinate and LBG in acidified systems: Rheology and phase behavior. **Food Hydrocolloids**, v. 23, p. 2085-2093, 2009.

PERROT, N.; TRELEA, I. C.; BAUDRIT, C.; TRYSTRAM, G.; BOURGINE, P. Modelling and analysis of complex food systems: State of the art and new trends. **Trends in Food Science and Technology**, v. 22, p. 304-314, 2011.

PICONE, C. S. F., TAKEUCHI, K. P.; CUNHA, R. L. Heat-induced whey protein gels: Effects of pH and the addition of sodium caseinate. **Food Biophysics**, v. 6,p. 77-83, 2011.

RIBEIRO, K. O., RODRIGUES, M. I., SABADINI, E., & CUNHA, R. L. Mechanical properties of acid sodium caseinate- κ -carrageenan gels: effect of co-solute addition. **Food Hydrocolloids**, v. 18, p. 71-79, 2004.

ROBERFROID, M.; GIBSON, G. R.; DELZWENNE, N. The biochemistry of oligofructose, a nondigestible fibre: na approach to calculate its caloric value. **Nutrition Reviews**, v.51, p.137-146., 1993.

ROWLAND, I. R.; RUMNEY, C. J.; COUTTZ, J.T.; LIEVENSE, L. C. **Effect of Bifidobacterium longum and inulin on gut bacterial metabolism and carcino-gen-induced aberrant crypt foci in rats**. *Carcinogenesis*, v.19, p. 281-285, 1998.

SABADINI, E.; HUBINGER, M. D.; CUNHA, R. L. The effects of sucrose on the mechanical properties of acid milk proteins- κ -carrageenan gels. **Brazilian Journal of Chemical Engineering**, v.24, p.55-65, 2006.

STEPHEN, A. M.; PHILLIPS, G. O.; WILLIAMS, P. A.; **Food Polysaccharides and their applications**, 2nd ed., 2006.

SUMMA, F.; MACRINI, L. **Os determinantes da inflação brasileira recente: estimações utilizando redes neurais**. *Nova econ.*, v.24, no.2, 2014.

TAKEUCHI, K. P. **Propriedades macro- e microscópicas de géis de proteínas do leite e κ -carragena**. Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia de Alimentos, Campinas, SP, 2008.

TAKEUCHI, K. P.; CUNHA, R. L. Influence of ageing time on sodium caseinate gelation induced by glucono- δ -lactone at different temperatures. **Dairy Science and Technology**, v. 88, p. 667-681, 2008.

TENSÃO de Rotura e Alongamento de Rotura. Disponível em: <https://www.ctborracha.com/borracha-sintese-historica/propriedades-das-borrachas-vulcanizadas/propriedades-fisicas/propriedades-mecanicas/tensao-e-alongamento-na-rotura/>. Acesso em: 10 dez. 2019.

XIN G. U.; CAMPBELL, L. J.; EUSTON, S. R. Influence of sugars on the characteristics of glucono- δ -lactone-induced soy protein isolate gels. **Food Hydrocolloids**, v.23, p.314-26, 2009.

ZHU, J. H.; YANG, X. Q.; AHMAD, I.; LI, L.; WANG, X. Y.; LIU, C. Rheological properties of kappa-carrageenan and soybean glycinin mixed. **Food Research International**, v. 41, p. 219-228, 2008.

APÊNDICE A – PESOS E BIAS DOS NEURÔNIOS PARA A RNA 5-16-12-3

Os pesos e bias aqui apresentados estão na forma com a qual se adiciona no Toolbox do Matlab.

$iw\{1,1\}$ – Weight to layer 1 from input 1

[1,6254 0,1218 -2,8280 1,7778 2,5419; 1,7692 0,8890 3,4877 0,7157 -2,2361; 0,4246 -1,3153 1,4523 -3,4090 4,1694; -0,0633 9,4040 0,0164 -1,2006 0,6195; -3,3495 1,7183 -2,3158 -4,3779 1,2257; -3,6364 -3,7510 0,7509 -0,5243 4,4786; 0,3379 -5,5418 -4,1551 1,5969 -0,0184; 1,8717 4,9530 2,6631 4,0548 4,8886; -2,4208 -7,9978 -1,4364 0,9793 2,1491; 1,4391 -2,9608 1,8961 -1,5037 2,3914; -3,8867 -2,2057 2,1155 0,9275 0,9993; 0,3258 1,1193 -2,8675 -0,8976 -2,6199; -0,6231 1,0260 -3,9834 -2,8172 0,4934; -0,0836 2,4803 0,1348 3,1818 1,7951; 0,0259 -4,0254 0,1355 -2,4668 -0,6373; -3,6371 -0,5409 -2,7480 -1,3892 -2,0705]

$iw\{2,1\}$ – Weight to layer

[1,2303 -1,3867 0,2738 0,8962 -0,6517 0,4050 1,9170 2,1546 -2,3260 -2,5904 -0,2054 0,1476 -2,4558 0,1994 -3,1646 -1,0843; 2,1154 -1,2765 -1,9079 -0,0939 -2,3291 2,0742 1,2832 0,0918 2,8844 -2,2293 -0,9264 -1,7101 -1,5636 0,4725 0,1242 -3,0090; -2,5818 0,4077 -2,1753 4,1361 -2,8940 -0,9641 -1,3644 -1,5472 -3,3826 -0,6822 -1,4322 -1,0079 -0,4259 -0,3450 -2,5929 2,8664; 1,9800 -0,8469 -1,0088 -2,2562 -3,8928 0,6641 0,8304 3,4729 2,7053 1,4381 2,2132 2,3864 -3,3011 1,9407 1,2463 0,5876; 0,3788 -2,7596 2,0910 2,0198 -1,1928 -2,7021 -1,5466 2,9965 -5,7039 0,8251 -1,8994 0,0619 1,3164 0,9587 -0,9206 -2,7184; 0,9403 -3,0493 1,5182 2,3268 1,2709 1,8471 2,5228 1,7207 -1,5390 -0,4140 3,2556 -3,1062 1,2541 1,5282 -0,2616 -0,4021; -2,1239 -1,0171 -2,9674 1,2223 -0,8188 2,3444 -0,0304 0,1948 2,5447 0,1112 -1,3242 -0,3156 2,1986 0,0023 3,0174 -0,8331; -0,2763 -0,0485 -0,3570 0,3057 3,1643 -2,8314 0,7723 4,3182 0,9578 0,5373 -1,0956 -1,6807 -1,7427 -0,5166 -1,8935 -2,1461; -1,4428 0,6533 2,2111 -2,1740 0,2681 0,7823 -2,8414 2,9883 0,1846 -0,9013 4,2632 -0,9807 1,6391 -2,2648 -0,3524 0,4250; 0,3495 0,3633 -1,4370 9,3783 -2,0035 -1,4740 -4,1013 5,5994 0,2196 2,0940 -4,4234 4,4475 -0,9987 0,0716 -1,5867 0,6044; -0,6895 2,1893 0,8942 -0,2792 -1,3972 4,5795 -1,5900 3,0206 -5,3070 2,7359 -1,3399 0,7788 -1,1472 -0,0901 -0,3920 1,5407; 0,8455 -0,3464 2,4456 3,0962 -0,6464 1,0046 -0,7863 0,6894 1,0496; -2,7794 2,1761 -1,7898 -1,1023 -1,9514 0,7909 -2,0950]

$iw\{3,2\}$ – Weight to layer

[0,6563 -1,5350 0,0183 2,3788 0,9424 1,8812 -3,1110 -0,6378 -2,5374 -2,3614 0,1661 -0,7640 2,5839 1,2208 2,3796 1,7048 -0,1715 2,8125 -0,8629 -0,0611 -1,5789 4,4580 0,8981 -1,3173 -1,2110 -0,0126 -2,4085 5,9523 -0,0509 4,9920 -1,0842 0,0593 3,8666 -1,7665 -0,9766 -1,6477]

$b\{1\}$ – Bias to layer 1

[-5,1619; -4,1487; -3,5116; 7,7334; 3,9214; 0,1365; -2,2468; 1,5946; -4,8026; 1,4651; -3,7272; 2,8066; 1,7923; -3,9592; 4,5046; -4,5646]

$b\{2\}$ – Bias to layer 2

[-1,9522; 2,6220; 7,5536; -6,0020; 1,2983; -5,6640; 0,2681; -1,2773; -3,1561; 1,1552; -5,3472; 3,0500]

$b\{3\}$ – Bias to layer 3

[-4,3660; 1,0370; -3,2318]